Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

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

Труды

61-й Всероссийской научной конференции МФТИ

19–25 ноября 2018

Фундаментальная и прикладная физика

Москва – Долгопрудный – Жуковский

МФТИ

2018

УДК 53
ББК 22.3
Т78

Труды 61-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 19-25 ноября 2018 года. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2018. – 353 с.

Т78

ISBN 978-5-7417-0687-9

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, препо давателей 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 978-5-7417-0687-9

© Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)», 2018

Оглавление

Программный комитет конференции **12**

Организационный комитет конференции **13**

СЕКЦИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ **14**

Выбор параметров входного окна газонаполненного сепаратора, работающего при повышенной интенсивности пучка тяжёлых ионов 14

О возможности ускорения ионов сжимающимися лайнерами: условия отсутствия коллективного торможения на электронах 15

Структуры электрических полей в грозовых облаках, поддерживающие длительные TGE 16

Распространение поверхностного поляритона в полупроводниковых гетероструктурах 17

Методика определения химического состава поглотителя рентгеновского излучения 19

Определение строения гиперразветвленного полиэфира BOLTORN и его производных методом спектроскопии ЯМР 20

Исследование изменчивости характеристик тропопаузы в арктической зоне по данным радиозондирования 21

Амплитудно-частотные характеристики воздушно-резонансных трансформаторов Н. Тесла и классическая модель возникновения в них колебательных процессов 22

Поиск парадокса Мпембы в процессе замерзания воды 24

Применение алгоритма Метрополиса с использованием имитации ударной волны для моделирования наночастиц сплава Cu–Ni 26

Уточнение вероятностной модели перемешивания диффундирующих частиц 28

СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ **30**

Механизмы передачи и релаксации электронного возбуждения в комплексах Sm(III) с лигандным окружением из класса β-дикетонатов 30

Проявление магнитоплазменных колебаний в 2D электронном газе в поглощении электромагнитных волн 32

Полевые транзисторы на основе графена и металлических наночастиц для создания фотодетекторов видимого и инфракрасного диапазона 34

Оценка влияния окружающей среды на оптические свойства тонких пленок меди 36

Расчет дисперсии решеточных плазмонных резонансов 37

Исследование митохондрий методом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния 38

Когерентность металл-полупроводниковых нанолазеров 39

Эффект суперинжекции в широкозонных полупроводниках 40

Управление зарядовым состоянием дефектов в алмазе и карбиде кремния 40

Спектральная эллипсометрия двумерного MoS_2 – анализ экситонных эффектов 41

Высокочувствительные оптические биосенсоры на основе металл-диэлектрических интерфейсов и адсорбционных поверхностей из двумерных материалов 43

Теоретическое исследование безызлучательной рекомбинации и оптического усиления в квантовых ямах из теллурида кадмия-ртути 44

Теория возмущений для гидродинамических плазменных эффектов в двумерных электронных системах 46

Диэлектрический отклик монокристаллических гексаферритов М-типа $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$ в терагерцовом-инфракрасном диапазоне частот....47
Спектроскопия плазмонного резонанса в графене....48
Оптические и электрические свойства тонких пленок меди и золота на различных подложках..50
Структурные свойства тонких пленок золота и меди на поверхности графена....51
Зарядовый транспорт и релаксация воды в биологических системах....52
Плазмонные резонансы в системе «графен-металлические наностержни» для усиления ИК поглощения биомолекул....53
Расчёт энергетического состояния системы «адатом - поверхность» с учётом внешнего электрического и магнитного полей....55
СЕКЦИЯ ПРИКЛАДНОЙ ОПТИКИ....57
Эффекты двухосного поверхностного потенциала при распределении профиля директора смектика С*, стабилизированного полимером....57
Уточненная концепция черной дыры и ее минимальный размер....59
Измерение квантового выхода синглетного кислорода в растворах бактериохлоринов....61
Концепция гетеродинного спектрометра среднего ИК-диапазона для исследования планетных атмосфер....62
Компактный лазерный гетеродинный спектрометр ближнего ИК-диапазона для прецизионных измерений контура линии CO_2 в столбе атмосферы Земли....63
Моделирование квазинекогерентной рефлектограммы в фазочувствительном рефлектометре с распределённым рамановским усилителем....64
Исследование ВКР-перекоса DWDM-каналов с разными типами модуляции....66
Описания динамики излучения криогенного лазера на основе аналога матрицы Шпольского....68
Исследование влияния ультразвука при осаждении миоглобина из водных растворов на ГКР-активные подложки....70
Влияние нелинейных эффектов на работу фазочувствительного рефлектометра в различных волокнах....71
Исследование свойств метаповерхностей....73
Применение болометра на эффекте электронного разогрева с планарной антенной в спектроскопии среднего инфракрасного диапазона....74
Методика оценки динамики зрительной деятельности человека....75
Расчет квазиклассических параметров фотона....76
Изучение изгибных потерь в волоконно-оптическом халькогенидном разветвителе в среднем ИК-диапазоне....78
Поляризационное световое поле в задаче трехмерного сканирования объектов....79
СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ....81
Комментарии к адиабатической теореме....81
Локальные симметрии NS 5-бран и Т-дуальность....83
Перепутанные состояния в одномерной и двумерной модели Кугеля-Хомского....84
Энергетические зависимости полного сечения резонансного и нерезонансного двумерного квантового диполь-дипольного рассеяния....85
Квантовая теория безмассового скалярного поля в двумерном пространстве Минковского при наличии неидеального движущегося зеркала....87
Об эволюции обобщенных когерентных состояний перевернутого осциллятора в однородном переменном поле....88

Статистическая физика взаимодействующих виртуальных кластеров на случайных ультраметрических деревьях 89
СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ 91
Комбинированные измерения митохондриального дыхания и продукции активных форм кислорода в тканях мозга 91
Биохимическое и биофизическое исследование CYP136 *M.tuberculosis* 93
Исследование конформационной динамики мембранных белков с помощью индуцированных белком изменений фотофизических параметров флуоресценцентной метки 94
Дизайн и синтез новых амфифильных полимеров для изучения мембранных белков методом поверхностного плазмонного резонанса 95
Исследования сенсорного домена бактериальной гистидин киназы QseC 95
О тесной связи воспалительных процессов и старения организма 96
Моделирование белок-липидного комплекса ротора АТФ-синтазы 97
Молекулярные механизмы G-белковой активации, исследованные микроскопией одиночных молекул и двухфотонной поляризационной микроскопией 98
Структурные и биофизические исследования термостабильного флуоресцентного белка на основе LOV-домена 99
Исследование динамики митохондриальной сети при помощи фотоконвертируемого белка Dendra2 99
Применение метода главных компонент для исследования динамики липидов в мембранных системах 100
Исследование вариантов термостабильного флуоресцентного белка на основе LOV-домена 101
Новые возможности применения кремниевых наночастиц в биофотонике 102
Структурные исследования гомолога глутаматного транспортёра из *Pyrococcus horikoshii* 103
Экспрессия эукариотической протонной помпы из *L.maculans* в LEXSY и ее структурный и функциональный анализ 104
Функциональные и структурные исследования вирусного родопсина OLPVR1. 105
Создание мономерных мутантов LOV-домена из термофильных бактерий *Chloroflexus aggregans* 106
Исследование воздействия антиоксидантов на длину теломер 107
Влияние гуанидин гидрохлорида на фотоцикл бактериородопсина 108
Структура модульных нанотранспортёров, полученная методом малоуглового рентгеновского рассеяния 109
Деконволюция данных, полученных с помощью установки малоуглового рентгеновского рассеяния Rigaku 109
Метод DLW-фотолитографии для исследования свойств биологических объектов 110
Верификация структуры тримера димеров комплекса NpSRII/HtrII с помощью метода малоуглового рассеяния 111
Изучение внутриклеточной локализации мономеров Aβ 1-42 методами современной флуоресцентной микроскопии 113
Успешное определение структуры рецептора, сопряжённого с G-белком, при помощи лазера на свободных электронах PAL XFEL 114
Оценка качества, оптимизация и автоматизация реконструкции изображений сверхвысокого разрешения 115
Исследование структурных и термодинамических свойств однодоменных антител 117

Изучение на молекулярном уровне схемы транспорта из эндоплазматического ретикулума в аппарат Гольджи 117

Идентификация нейтрофилов, ассоциированных с кровеносными и лимфатическими сосудами в легких мышей с воспалением, вызванным ингаляцией спор гриба *Aspergillus fumigatus* 119

Исследование генетического разнообразия LOV-фоторецепторов 122

Исследование структурных изменений в липидных везикулах в двух фазах 123

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ 124

Влияние влажности воздуха на распространение лазерных импульсов в режиме филаментации 124

Лазер для получения одетых состояний и последующего охлаждения атомов тулия 125

Подготовка внутренних состояний охлажденных атомов тулия с помощью оптической накачки 126

Об использовании приближения сильно связанных электронов в задаче о динамике электронов в кристалле в постоянном электрическом поле 127

Эффект Лензе-Тирринга в сильном поле 129

СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ 133

Изучение свойств туннельных топологических джозефсоновских контактов 133

Хиральное взаимодействие, вызванное сверхпроводящим током 135

Расширение коров сверхпроводящих вихрей в диффузном металле 137

Необычное проявление сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма в железосодержащем пниктиде $RbEuFe_4As_4$ 139

Реализация трёхкубитной схемы на трансмонах 141

Генерация джозефсоновских вихрей локальным магнитным полем кантилевера МСМ 143

Неборновские эффекты в рассеянии электронов в чистой проводящей трубке 144

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР 146

Система стабилизация температуры резонатора акустического газового термометра 146

Быстродействие низкотемпературных приемников с СИНИС болометром на частоте 350 ГГц. 148

Тонкопленочный низкотемпературный эмиттер электронов 149

Энергетическая щель в квазиодномерном S = 1/2 антиферромагнетике с однородным взаимодействием Дзялошинского–Мории $K_2CuSO_4Cl_2$ 151

Critical Temperature in Aluminum Films 152

СЕКЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ И ЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ 153

Проблемно-моделирующая среда для анализа газокинетических процессов в полости межэлектродного зазора термоэмиссионного электрогенерирующего канала ЯЭУ 153

Генерирование сеток Коробова и точность вычисления интегралов для анализа газокинетических процессов 155

Компьютерное моделирование течения разреженного газа по тонкой трубке на основе кинетической теории 157

Анализ и компьютерное моделирование движения аэрозоля в верхних слоях атмосферы 159

Моделирование ударных волн в микроканалах на основе теории Больцмана 160

Исследование свободномолекулярного течения газов в узких каналах. 162

СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 165

Диффузия в леннард-джонсоновской системе.....165
Решение системы уравнений, моделирующей эффект «ion wake», методом решеточных уравнений Больцмана 167
Исследование распределения по скоростям в системе малого числа частиц.....168
Процессы релаксации распределения по скоростям в классической молекулярно-динамической модели 170
Сжатие больших данных в микроскопии.....172
СЕКЦИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ.....174
Адаптация метода теневого напыления для изготовления высококогерентных сверхпроводящих структур.....174
Взаимодействие вихрей Абрикосова с искусственным массивом сверхтвердых ферромагнитных ловушек 175
Z-импульсы на трансмонах 176
Разработка однофотонного детектора микроволнового диапазона частот 178
Измерение частотных характеристик кинетической индуктивности в сверхпроводящих пленках 179
СЕКЦИЯ НАНООПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ 182
Динамика образования иона XeI^+ при ионизации смешанных кластеров $(CF_3I)_n(Xe)_m$.....182
Оптические и механические свойства тонкопленочных покрытий на основе одностенных углеродных нанотрубок 183
Локализация атомов импульсным полем фемтосекундной длительности 186
Эффект Парселла в металлоорганической нано-патч антенне с излучателем в виде Ru-комплекса 186
Квантовая электронная плазма и взаимодействие *H*-волн с одномерным металло-диэлектрическим фотонным кристаллом.....188
Два типа изолированных (квантовых) излучателей, связанных с дислокациями в твёрдом растворе CdZnTe.....190
Люминесцентные свойства оптически активных центров в кристаллическом ZnSe:Fe при низких температурах.....192
Оптические свойства SiV центров в ультрамаленьких наноалмазах 194
Свойства запутанных квантовых состояний систем одинаковых атомов в магнитных полях.....195
Структура и электрооптические свойства монокристаллов $CH_3NH_3PbI_3$ 197
Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния атомарно тонких слоёв MoS_2 199
Высаждение наноалмазов методом вакуумного испарения 200
Люминесцентные свойства боратов $LnGa_3(BO_3)_4$ (*Ln* = Nd, Sm, Er, Dy, Ho).....201
Особенности электронных спектров GeV^- - центров в CVD-алмазах при низких температурах 203
Магнонная мода в спектре комбинационного рассеяния 205
СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ.....208
Продлённое излучение в кривых блеска космических гамма-всплесков, зарегистрированных экспериментом SPI-ACS INTEGRAL 208
Об определении магнитного потока в релятивистском струйном выбросе в окрестности черной дыры 210
Зональные течения двумерной вырождающейся магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости.....212

Исследование автомодельного решения о распространении сильной ударной волны в расширяющейся Вселенной 213
Линзирование конуса световых лучей керровской черной дырой 215
Связь между широкополосными радиоспектрами и парсековой структурой внегалактических радиоисточников по результатам наблюдений полной выборки радиоисточников склонением выше +75 градусов 216
Спектр Солнца в ближнем инфракрасном диапазоне по данным ACS NIR на борту TGO 217
Сезонные карты CO_2 льда по данным СПИКАМ/Марс-Экспресс 218
Численное моделирование магнитогидродинамической турбулентности в трехмерной вращающейся плазме 219
Сжимаемые магнитогидродинамические течения астрофизической плазмы в приближении мелкой воды 220
Изучение влияния облачности на радиационный баланс Земли по данным спутниковых измерений 222
Распространение волн в магнитосфере миллисекундных радиопульсаров с использование реалистичных магнитных полей 224
Волны Россби в магнитной гидродинамике стратифицированной плазмы в приближении двуслойной мелкой воды 225
Аналитическая теория сдвиговой турбулентности в космической плазме 227
Исследование молодого массивного звёздного объекта G192.16-3.82 228
Ортогональные интеримпульсные радиопульсары — ключ к пониманию закона их эволюции 229
Широкополосный спектр рентгеновской двойной системы M33 X-6 по данным NuSTAR и Swift-XRT. Внегалактический источник Z-типа? 231
СЕКЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ 233
Лазерная масс-спектрометрия биологических объектов для фармакологических и гистологических исследований 233
Лазерная генерация удлинённых наночастиц при импульсном облучении золота в воде и водных растворах $CaCl_2$ 235
Упрочнение сплава ЭП517-Ш при помощи импульсного лазера мощностью до 50 МВт под воздействием гидроудара 237
Упрочнение никелевого жаропрочного сплава ХН73МБТЮ (ЭИ698ВД) мощным импульсным лазером 239
Анизотропия зарядового транспорта и магнитные фазовые переходы в антиферромагнетике HoB_{12} 240
Влияние примеси ионов титана на низкоэнергетическую динамику гексаферрита бария 242
Диссоциация воды под действием плазмы лазерного пробоя 244
Изучение влияния термической обработки на структуру стали РН1, полученной методом селективного лазерного плавления 246
Анализ изомерного состава алканов по спектрам комбинационного рассеяния света 248
Широкодиапазонная спектроскопия твердых растворов замещения на основе гексаферрита бария 250
Легированные висмутом волоконные световоды с сердцевиной, изготовленной из нанопористого кварцевого стекла 251
Перспективные направления в микро- и наноструктурировании объёма прозрачных диэлектриков сверхкороткими лазерными импульсами 253

Температурные особенности спектров поглощения пленок из неупорядоченных однослойных нанотрубок различной длины 255
СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ 258
Экспериментальное изучение сценария фазовых переходов в квазидвумерных плазменно-пылевых системах 258
Расчёт влияния градиента температуры вдоль стенки газоразрядной трубки на ориентацию одномерных плазменно-пылевых структур при криогенных температурах....259
Спектральные характеристики теплового движения заряженных частиц в изотропной ловушке в присутствии магнитного поля....260
Цифровая голография в задаче диагностики плазменно-пылевых образований 260
Термодинамические функции нейтрального и положительного иона гидрида аргона 262
Влияние нелинейного экранирования на термодинамику комплексной плазмы 264
Испарение и ионизация составляющих смесевого катода из CeO_2 и Cr в диффузной вакуумной дуге для задач плазменной сепарации ОЯТ 265
Активное броуновское движение частиц с модифицированной поверхностью в плазменно-пылевом монослое при воздействии лазерного излучения 266
Исследование тягово-энергетических характеристик плазменных актуаторов при пониженном давлении 267
Исследование электрических характеристик плазменных актуаторов при различных давлениях 268
Согласованная интерпретация динамических экспериментов для молибдена в окрестности кривых плавления и испарения....269
Торрефикация биомассы в неподвижном слое минерального наполнителя – метод повышения калорических характеристик биотоплива 270
Условия устойчивости плазменно-пылевых цепочек в газовом разряде постоянного тока с переменной полярностью 272
Эффективная вязкость суспензии Paramecium caudatum в водном растворе полимера 272
Определение сил межчастичного взаимодействия в плазменно-пылевых цепочках в условиях микрогравитации....274
СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ 275
Сравнение квазиодномерной и двухмерной моделей процесса «самопогружения» тепловыделяющего шара....275
Перенос примеси в трещиновато-пористой среде, содержащей редкие случайные включения, сорбирующие примесь....277
Расчетное моделирование выхода активности из негерметичного твэла со сплошными таблетками в условиях облучения на АЭС «Козлодуй» 279
Результаты электрофизического неразрушающего контроля сварных соединений в образцах из сталей 281
Модификация эвристического оптимизационного алгоритма Harmony Search в применении к задаче калибровки профильной фильтрационной модели 283
Применение эвристических оптимизационных алгоритмов к задаче поиска источника загрязнения 285
СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ....287
Поглощение электромагнитной волны резонатором на основе диэлектрической пластины....287
Оптимизация формы контура зеркала коллиматора....289

Применение автокодировщика на базе нейронной сети для характеризации наноразмерных шероховатостей 290
Исследование влияния ультразвука при осаждении миоглобина из водных растворов на ГКР-активные подложки 292
Получение и применение тонких плёнок VO_2 в электродинамических приложениях....292
Оптимизация процессов генерации поверхностных плазмон-поляритонов ансамблями полупроводниковых квантовых точек, размещенных вблизи металлической поверхности 293
СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ» 296
Томография объектов с использованием мюонов космических лучей 296
Исследование влияния 3*N*-сил на величину извлекаемой энергии синглетного *pp*-состояния в реакции $d+{}^1\mathrm{H}\rightarrow p+p+n$ 296
Измерение основных характеристик лавинных фотодиодов для исследования распадов каонов в эксперименте NA62....297
Вклад операторов размерности 7 в взаимодействие топ-кварка с нейтральным током с нарушением аромата 300
Калибровка модулей адронного калориметра установки MPD/NICA 300
Проект детектора ANTI-0 для эксперимента NA62 (CERN)....303
Исследование вето системы нейтринного детектора NuPRISM 305
Сечение захвата солнечных нейтрино ядром ^{76}Ge 306
Проектирование детектора протонов и электронов для мониторинга солнечных космических лучей....308
Применение пиксельных полупроводниковых детекторов с GaAs:Cr сенсором и Timepix микросхемой для контроля потока нейтронов....310
Отбор взаимодействий мюонных нейтрино в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K ...313
Проверка предсказаний киральной эффективной теории в эксперименте COMPASS 313
Статус измерения массы состояния $X(3872)$ в современных экспериментах в физике высоких энергий 314
Распределение спектаторной материи по заряду и массе в модели Abration-Ablation....316
Коррекция динамики пучка вторичных электронов в анализаторе фазового спектра сгустков ..318
Наблюдательные проявления аксионной темной материи 320
Использование мишелевских электронов для идентификации пи-мезонов в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K 320
СЕКЦИЯ «ИТЭР – ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО» 322
Отработка технологии быстрой вакуумной индукционной пайки бериллиевой облицовки панелей первой стенки ИТЭР 322
Тестирование макета импульсного рефрактометра (МИР) ИТЭР на токамаке Т-11М....324
Экспериментальная отработка компонентов макета рефрактометра ITER 327
Влияние магнитного поля на эрозию металлов, обусловленную расплескиванием и разбрызгиванием расплава при воздействии мощных потоков плазмы 328
Макет испытательного модуля бланкета с керамическим бридером и жидкометалическим теплоносиетелм для стендовых испытаний....330
Моделирование дифракции синхротронного излучения в мозаичном монокристалле....333
Свойства продуктов эрозии вольфрама при его облучении интенсивными потоками плазмы ...333
Оценка предельно допустимых деформаций в системе сбора света диагностики «Активная спектроскопия ИТЭР» с помощью программного пакета Zemax 334

Осуществление контроля за уровнем бериллиевых загрязнений при изготовлении малых макетов панелей первой стенки ИТЭР 336

Применение компактного датчика давления на основе пьезокерамики для измерения давления торможения потока плазмы на установке КСПУ-Т....338

Моделирование спектров быстрых частиц для тангенциального спектрометра ИТЭР 340

Панель первой стенки модуля бланкета ИТЭР с механическим креплением энергонапряженных компонентов....342

Методика калибровки спектрометра, разработанного для диагностической системы «Активная спектроскопия» ИТЭР, по длинам волн с использованием эталона Фабри–Перо 342

СЕКЦИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ....345

Количественное описание корреляций, сопровождающих немарковскую квантовую динамику при смешивании марковских процессов....345

Немарковская динамика и деформации квантовых марковских цепей....347

Сравнение модели столкновений и предела низкой плотности для динамики открытых квантовых систем....348

Влияние свойств неклассического смешанного состояния накачки на свойства запутанности фотонов в процессе параметрической генерации 350

Корреляционные свойства суперпозиций многофотонных поляризационных состояний....351

Программный комитет конференции

Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель

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

А.А. Воронов, проректор по учебной работе и довузовской подготовке

А.В. Дворкович, директор ФРКТ

В.В. Киселев, директор ФФПФ

С.С. Негодяев, директор ФАКТ

В.В. Иванов, директор ФЭФМ

А.М. Райгородский, директор ФПМИ

В.Б. Назаров, 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

А.Ю. Беловолов, 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

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

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

Секретарь: В.А. Яворский (к.ф.-м.н.)

Дата: 24.11.2018

Время: 12:30

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 3, ауд. 517 ГК, МФТИ

УДК 621.039

Выбор параметров входного окна газонаполненного сепаратора, работающего при повышенной интенсивности пучка тяжёлых ионов

Д.А. Ибадуллаев

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Детальное исследование свойств сверхтяжелых ядер (СТЯ), образующихся в реакциях полного слияния ускоренных ионов ^{48}Ca с ядрами актинидных мишеней, предполагает использование пучка ионов с интенсивностью, значительно превышающей ту, при которой эти ядра были синтезированы ранее [1]. Эти реакции приводят к СТЯ с атомными номерами $112 \leq Z \leq 118$. Получение еще более тяжелых ядер с $Z > 118$ требует использования более тяжелых ускоренных ионов, таких как ^{50}Ti, ^{54}Cr, ^{58}Fe и т. д., с интенсивностью большей, чем та, что была достигнута в экспериментах с ^{48}Ca. Высокие интенсивности пучков тяжёлых ионов должны быть получены на новом циклотроне DC-280, базовой установке фабрики сверхтяжёлых элементов Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова. Ожидаемая интенсивность пучка тяжёлых ионов ускорителя DC-280 составит 10^{14} с$^{-1}$ для ионов с массой до 50 а.е.м. и энергией от 4 до 8 МэВ/нуклон [2]. При этих интенсивностях и энергиях пучка удельные мощности, генерируемые внутри тонких мишеней и фольг, могут достигать нескольких сотен Вт/см^2. Работа Дубненского газонаполненного сепаратора отдачи (ДГНС), используемого в экспериментах по синтезу СТЯ вплоть до последнего времени [1], должна быть обеспечена в таких условиях. В настоящее время циклотрон U-400, на котором проводятся эти эксперименты, выдает пучок ^{48}Ca с интенсивностью ~10^{13} с$^{-1}$. Это позволяет регистрировать события распада, соответствующие образованию нескольких сверхтяжёлых ядер в месяц, при имеющейся эффективности ДГНС [3] и сечении образования СТЯ в районе нескольких пб.

В ДГНС используется вращающаяся мишень (оптимальная толщина ~0,4 мг/см^2 оксида актинида, нанесенного на Ti подложку 0,71 мг/см^2) и вращающееся входное окно с такой же толщиной Ti фольги [4]. Входное окно отделяет внутренний объем ДГНС, заполненный водородом до давления 1 Торр, от циклотронного вакуума (давление в ионопроводе ~10^{-6} Торр). Эти элементы ДГНС позволяют выдерживать имеющуюся интенсивность циклотронного пучка U-400 в течение продолжительного времени [1]. Как уже отмечалось, синтез СТЯ с $Z > 118$ предполагает использование пучка частиц более тяжелых, чем ^{48}Ca (^{50}Ti, ^{54}Cr и т.д.).

Очевидно, что высокие удельные мощности, создаваемые интенсивными пучками тяжёлых ионов во входном окне сепаратора, а также большие дозы пучка, набираемые в эксперименте, снижают долговечность и ухудшают эксплуатационные свойства титановых фольг. Считается, что деградация фольг происходит за счет распыления атомов, радиационных повреждений кристаллических решеток и воздействия повышенной температуры [5]. Температура фольги определяется мощностью нагрева, генерируемой внутри нее интенсивным пучком ионов и

теплоотводом. В условиях ДГНС отвод тепла с элементов, подвергаемых воздействию интенсивного пучка тяжёлых ионов, может осуществляться путем теплопроводности, конвекции и процессов излучения [6]. Одним из способов значительно снизить тепловую нагрузку является использование импульсного режима. В случае непрерывного пучка импульсный режим может быть реализован с помощью вращения входного окна.

В данном докладе рассмотрена устойчивость работы входного окна при повышенной интенсивности пучка тяжёлых ионов. Устойчивость работы входного окна оценивается как результат воздействий интенсивного пучка тяжёлых ионов, таких как распыление, радиационные повреждения и температуры [5]. Обсуждаются оценки этих воздействий, определяющих стойкость входного окна. Вычисляется температура входного окна как функция времени в условиях его импульсного нагрева пучком тяжёлых ионов с последующим радиационным охлаждением и излучением, испускаемым с его поверхности. Проводится расчёт температур входного окна при облучении пучками тяжёлых ионов, таких как ^{48}Ca, ^{50}Ti, ^{54}Cr и ^{58}Fe с интенсивностями, соответствующими ожидаемым на ускорителе DC-280. На основании полученных расчётов зависимости температуры от времени воздействия пучков осуществляется выбор оптимальных параметров работы входного окна.

Литература

1. *Oganessian Yu.Ts., Utyonkov V.K.* [*et al.*] Superheavy nuclei from ^{48}Ca-induced reactions // Nucl. Phys. A. 2015. Vol. 944. P. 62–98.
2. *Gulbekian G.G., Dmitriev S.N., Oganessian Yu.Ts., Gikal B.N., Kalagin I.V., Bogomolov S.L., Ivanenko I.A., Kazarinov N.Yu., Ivanov G.N.and Osipov N.F.* Status of the DC-280 cyclotron project // Proceedings of the 21st International Conference on Cyclotrons and their Applications. Zurich. Switzerland, 2016. P. 278–280.
3. *Subotic K., Oganessian Yu.Ts., Utyonkov V.K., Lobanov Yu.V., Abdullin F.Sh., Polyakov A.N., Tsyganov Yu.S. and Ivanov O.V.* Evaporation residue collection efficiencies and position spectra of the Dubna gas-filled recoil separator // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 2002. A. Vol. 481, P. 71–80.
4. *Ivanov G.N.* A device for heavy ion beam input into a gas-filled magnetic separator // Heavy Ion Physics, Scientific Report 1989–1990. Ed. by B. I. Pustyl'nik, JINR E7-91-75 (Dubna, 1991). P. 162–163.
5. *Yntema J. and Nickel F.* Targets for heavy ion beams // Experimental Methods in Heavy Ion Physics, Lecture Notes in Physics. 1978. Vol. 83. P. 206–235.
6. *Sagaidak R.N.* Durability of targets and foils irradiated by intense heavy ion beams in experiments on synthesis of superheavy nuclei // PEPAN Letters, Pleiades Publishing (to be published in vol. 14, N. 4, 2017).

УДК 533.9.01

О возможности ускорения ионов сжимающимися лайнерами: условия отсутствия коллективного торможения на электронах

А.С. Дзарахохова[1], Н.П. Зарецкий[2], А.В. Максимычев[1], Л.И. Меньшиков[1,2], П.Л. Меньшиков[2]

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

Ранее нами уже обсуждалась возможность создания сверхмощного импульсного источника характеристического рентгеновского излучения на основе компактного ускорителя тяжёлых ионов, ускоряемых в магнитном поле, сжимаемом газовым лайнером, предложенного в работе [1]. На рис. 1 представлена его принципиальная схема.

Для осуществления ускорения необходимо подавить коллективное торможение ионного пучка на электронах, обусловленного возбуждением ионами электронных плазменных колебаний, то есть пучковая неустойчивость. Цель нашего исследования состоит в выборе условий отсутствия указанного коллективного торможения. В литературе обычно считается, что коллективный эффект исчезает, если ионный пучок достаточно немонохроматичен по энергии. В данной работе показано, что этого недостаточно: для исчезновения когерентности взаимодействия ионов с электронами требуется ещё и наличие достаточно большого разброса по скоростям электронов. При этом возникает затухание Ландау возбуждаемых ионами плазменных волн на электронах, которое и подавляет пучковую неустойчивость. Условие подавления имеет вид

$$\varphi > \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^3 \frac{\xi}{\delta_i^2} \sim \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^3 \xi .$$

Здесь $\delta_i=\Delta_i/u$, Δ_i – характерный разброс по скоростям ионов, u – их скорость, $\xi = \frac{\omega_i^2}{2\omega_e^2} \sim 1{,}5\cdot 10^{-4}$ (приводимые здесь и далее численные значения параметров соответствуют типичным условиям, характерным для предполагаемого импульсного источника рентгеновского излучения). Далее, ω_i и ω_e – плазменные частоты ионов и электронов, $\varphi = \frac{\sqrt{\pi}}{\delta_e^3}\exp\left(-\frac{1}{\delta_e^2}\right)$, $\delta_e = \Delta_e / u$, которое в нашем случае выполняется при $\delta_e > 0{,}19$. В нашем случае $\delta_i \sim \delta_e \sim 1$, поэтому коллективные эффекты торможения ионов на электронах отсутствуют в течение всего процесса ускорения.

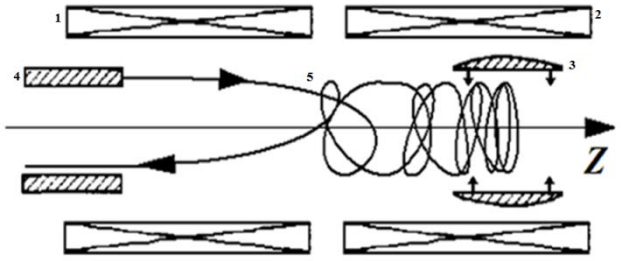


Рис. 1. Принципиальная схема импульсного инжектора ионов на основе сжимающегося газового лайнера 3 в виде полого цилиндра (при использовании лайнера в виде цилиндрической газовой струи может быть достигнута высокая частотность импульсов). Соленоиды 1 и 2 с полем $B_i \sim 10$ Тл, включённые навстречу друг другу, создают магнитное поле с конфигурацией типа «касп». Кривая 5 – траектория одного из ионов, испускаемых импульсным коаксиальным диодом 4 с магнитной изоляцией

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 539.122.04

Структуры электрических полей в грозовых облаках, поддерживающие длительные TGE

М.Е. Зелёный

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

В современные исследования посвященных проблема грозовых разрядов большее внимание уделяется наблюдениям за потоком гамма-квантов и релятивистских электронов, возрастающих в периоды, предшествующие грозовому разряду. Измерение потока и энергетического спектра этих частиц дает возможность проверять корректность моделей, описывающих образование молнии, или модель описывающую структуру электрических полей, которые труднодоступны для непосредственного наблюдения и не могут быть воспроизведены в лабораторных условиях. В данной работе мы рассмотрим результаты наблюдений за потоками частиц от облаков, произведенными на научной станции на горе Арагац в Армении, и рассмотрим, как они согласуются с трипольной структурой электрического заряда в грозовом облаке. Также будут рассмотрены результаты моделирования, произведенного с помощью транспортных кодов GEANT4 и CORSIKA.

Литература

1. *Chilingarian A., Hovsepyan G., Soghomonyan S., Zazyan M., and Zelenyy M.* Structures of the intracloud electric field supporting origin of long-lasting thunderstorm ground enhancements // Phys. Rev. D 98, 082001 – Published 3 October 2018.

УДК 621.315.592

Распространение поверхностного поляритона в полупроводниковых гетероструктурах

***А.Б. Дюбуа*[1], *А.А. Иванова*[1], *Е.С. Куликова*[1], *С.И. Кучерявый*[2], *С.Н. Машнина*[1], *А.С. Сафошкин*[1]**

[1]Рязанский государственный радиотехнический университет
[2]Обнинский 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 (рис. 1).

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, 3], 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 не параллельные плоскости. Условия непрерывности в совокупности с уравнениями Максвелла для таких задач связаны с решением сложных интегродифференциальных уравнений [4], которые имеют аналитическое решение только для определенных геометрий [5]. 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 представляет собой четыре области, характеризующиеся диэлектрическими проницаемостями ε_1 – вакуум, $\varepsilon_2(\omega)$ – металл, ε_3 – тонкая полупроводниковая нелинейная пленка, ε_4 – диэлектрик.

Уравнения Максвелла

$$i\omega\mathfrak{H} = c\,\mathrm{rot}\,\mathfrak{E} \text{ и } i\omega\varepsilon_i(\omega)\mathfrak{E} = -c\,\mathrm{rot}\,\mathfrak{H}$$

в декартовой системе в совокупности с гармоническим характером распространения каждой моды вдоль оси X $\{\mathfrak{H}(x,z),\mathfrak{E}(x,z)\} = \{\mathbf{H}(z),\mathbf{E}(z)\}\exp(ik_x x)$ связывают компоненты мод ТМ — поляризованного излучения (E_x, E_z, H_y) следующим образом: $\mathfrak{E}_x(x,z) = \frac{ic}{\omega\varepsilon_i}\frac{\partial H_y}{\partial z}$;

$\mathfrak{E}_z(x,z) = \frac{ic}{\omega\varepsilon_i}\frac{\partial H_y}{\partial x}$; $E_x(z) = \frac{ic}{\omega\varepsilon_i}\frac{dH_y}{dz}$; $E_z(z) = -\frac{c}{\omega\varepsilon_i}k_x H_y(z)$, что легко получить из (1), учитывая планарность задачи [3].

Полученные результаты должны удовлетворять закону сохранения энергии [6]: $P^i = P^R + P^T + P^{sp}$, 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 [7] является критерием истинности полученных результатов. Для удобства целесообразно нормировать полученные величины таким образом, чтобы падающий поток был равен единице, а вектор Пойнтинга был безразмерной величиной [8]. Для этого введем новые «нормированные» параметры гауссова пучка: $C_n = C_0/G$, $W_n = (2\pi/\lambda)W_0$, $k_x^{'} = k_x / k_0$., G — некоторая размерная функция. Тогда для падающего потока $P_x^i = \frac{c^2}{4\pi\omega}\int_0^{\infty} I_\beta I_\beta^* k_x^{(1)}d\beta = \frac{c}{8\pi}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}}C_0^2 W_0 \frac{\pi}{2} = \left[\frac{cG^2\lambda}{16\pi^2}\right]\left(\frac{\pi C_n^2 W_n}{2\sqrt{\varepsilon_1}}\right)$. В квадратных скобках – размерная величина, в круглых – нет. Первый множитель будет одинаков у всех потоков, поэтому на него можно сократить. Тогда нормированный падающий поток будет равен $P_{x,norm}^i = \frac{\pi C_n^2 W_n}{2\sqrt{\varepsilon_1}} = 1$ при $C_n = \sqrt{\frac{2\sqrt{\varepsilon_1}}{\pi W_n}}$.

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.

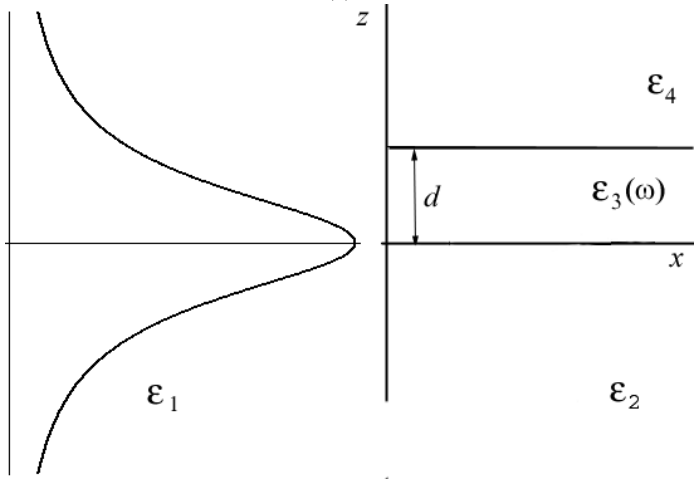


Рис. 1. Схема дифракции при нормальном падении электромагнитного излучения на диэлектрический барьер

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. *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. *Петров Д.В.* // Квантовая электроника. 1(2), 329, 1974.
5. *Шевченко В.В.* Плавные переходы в открытых волноводах. М.: Наука, 1978.
6. *Агранович В.М., Кравцов В.Е., Лескова Т.А.* // ЖЭТФ, 81(11). С. 1828. 1981.
7. *Voronko A.I., Klimova L.G., Shkerdin G.N.* // Solid State Comm., 6. P. 361, 1987.
8. *Поверхностные поляритоны* ./ под ред. В.М. Аграновича, Д. Миллса. М.: Наука, 1986.

УДК 53.08

Методика определения химического состава поглотителя рентгеновского излучения

С.Н. Жабин, Г.А. Коротеев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрено современное состояние спектрально чувствительной рентгеновской компьютерной томографии и предложена альтернативная методика восстановления химического состава рентгеновского поглотителя, основанная на применении нечувствительных к спектру CMOS матриц.

Различия в спектральной зависимости сечения поглощения рентгеновского излучения атомами разных химических элементов дают принципиальную возможность получать информацию об элементном составе рентгеновского образца-поглотителя.

$$I(E_0) = \int_0^{E_0} J_{E_0}(E)dE \tag{1}$$

При прохождении рентгеновского излучения в диапазоне энергий фотонов до 200 кэВ через вещество происходит преимущественно поглощение излучения. Такое поглощение можно описать в терминах сечения поглощения μ_Z, которое также имеет некоторую спектральною зависимость $\mu_Z = \mu_Z(E)$; здесь индекс Z – заряд ядра атома химического элемента, входящего в состав образца-поглотителя. Если вещество образца-поглотителя включает в себя несколько различных химических элементов, каждый из которых может быть характеризован эффективной толщиной h_Z, то интенсивность излучения после прохождения такого образца запишем в виде

$$I_1(E_0) = \int_0^{E_0} J_{E_0}(E) \cdot \exp(-\sum_Z \mu_z(E) \cdot h_Z)dE\,. \tag{2}$$

Распределение значений эффективных толщин h_Z для разных типов элементов, входящих в состав поглотителя, и требуется определить. Для этого предлагается экспериментально получить ряд величин интегральной спектральной интенсивности для различных ускоряющих напряжений на трубке. При использовании сцинтиллятора и КМОП-матрицы сигнал с каждого пикселя матрицы пропорционален интегральной по спектру интенсивности:

$$S(E_0) = k \cdot I(E_0)\,. \tag{3}$$

Коэффициент пропорциональности k описывает эффективность преобразования энергии рентгеновского излучения в цифровой сигнал, регистрируемый аппаратурой. Как показали предварительные измерения, зависимость (3) действительно имеет место до тех пор, пока не будет достигнут уровень насыщения регистрируемого сигнала.

Для того чтобы явным образом не учитывать значение коэффициента k, можно работать не с самим значением регистрируемого сигнала, а с его нормированной величиной:

$$s(E_0) = \frac{S_1(E_0)}{S(E_0)} = \frac{k \cdot I_1(E_0)}{k \cdot I(E_0)} = \frac{\int_0^{E_0} J_{E_0}(E) \cdot \exp(-\sum_Z \mu_z(E) \cdot h_Z)dE}{\int_0^{E_0} J_{E_0}(E)dE} =>$$

$$=> s(E_0) = \int_0^{E_0} \frac{J_{E_0}(E)}{\int_0^{E_0} J_{E_0}(E)dE} \cdot \exp(-\sum_Z \mu_z(E) \cdot h_Z)dE = \int_0^{E_0} \Phi_{E_0}(E) \cdot \exp(-\sum_Z \mu_z(E) \cdot h_Z)dE. \tag{4}$$

$\Phi_{E_0}(E)$ – нормированное распределение спектральной плотности интенсивности рентгеновского излучения при ускоряющем напряжении E_0. При проведении практических измерений величину $\Phi_{E_0}(E)$, необходимо измерить для заданной рентгеновской трубки.

Критерий оптимизации можно определить через минимизацию функцию ошибки:

$$Err(\{Z_m\}) = \sum_n (s_n - \int_0^{E_0} \Phi_n(E) \cdot \exp(-\sum_m \mu_{z_m}(E) \cdot h_{Z_m}) dE)^2 . \quad (5)$$

На основе предварительных измерений было показано, что образцы, состоящие из материалов с сильно различающимися атомными номерами, могут быть распознаны с помощью описанной в работе методики, без использования спектрально чувствительных детекторов рентгеновского излучения.

Литература

1. *Shikhaliev PM.* Computed tomography with energy-resolved detection: a feasibility study // Physics in medicine and biology. 2008;53:1475–95. pmid:18296774.
2. *Bateman C.J.* [*et al.*] MARS-MD: rejection based image domain material decomposition // 2018 Journal of Instrumentation 13 P05020.

УДК 543.429.23

Определение строения гиперразветвленного полиэфира BOLTORN и его производных методом спектроскопии ЯМР

***В.А. Шпотя*[1], *А.М. Перепухов*[1], *А.В. Максимычев*[1], *В.И. Гомзяк*[2], *С.Н. Чвалун*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]МИРЭА–Российский 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 спектроскопии ЯМР изучаются свойства гиперразветвленного полиэфира 2.2-бис(метилол)пропионовой кислоты (полиэфир BOLTORN), а также его производных с полилактидом. В зависимости от количества полилактидных групп можно управлять химическими и физическими свойствами итоговой молекулы. Основной целью является установление структуры производного полиэфира BOLTORN с полилактидом. Для достижения цели были поставлены задачи определения числа полилактидных групп в производных BOLTORN, а также определения числа активных центров в молекуле BOLTORN.

Число активных центров в молекуле BOLTORN, являющихся потенциальными местами присоединения полилактидных групп, определяется строением молекулы и может быть оценено с помощью методов ЯМР. В структуре полиэфира BOLTORN повторяющиеся звенья делятся на три типа: терминальные (или концевые, T), линейные (L) и дендридные (разветвляющиеся, D). При этом в силу строения активные центры – гидроксильные группы – есть в терминальных звеньях (2 шт) и в линейных звеньях (1 шт). В спектрах ^{1}H-ЯМР значения химических сдвигов для звеньев различных типов отличаются. В данной работе удалось определить соответствие различных типов групп с сигналами в спектре ^{1}H-ЯМР полимера BOLTORN, используя методы одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР (^{1}H-ЯМР, ^{13}C-ЯМР, TOCSY, HMBC, HSQC). В ранее опубликованных статьях, посвящённых изучению структуры полиэфира BOLTORN методом

спектроскопии ЯМР, присутствуют разногласия в отнесении, которые удалось разрешить, прибегнув к двумерным методам ЯМР [1, 2].

Полилактидные группы дают сигналы в ^{1}H-ЯМР и ^{13}C-ЯМР спектрах, близкие к сигналам самой молекулы BOLTORN, но вместе с тем отличные от них. При этом сигналы от внутренних и концевых звеньев цепей полилактида разрешены, а сигналы от молекулы BOLTORN теряют разделение по типам звеньев и представляются как дендридные. Это позволило сделать вывод о среднем числе и длине полилактидных цепей для разных образцов. К тому же методом DOSY было выявлено наличие двух подсистем молекул в образце с разными размерами. Сопоставляя с одномерными спектрами, был сделан вывод о наличии в системе свободноплавающих агрегатов из полилактидных групп.

Таким образом, в данной работе получена оценка числа и длины полиактидных цепей в производных BOLTORN. Так же получено отнесение пиков в спектре ^{1}H-ЯМР полиэфира BOLTORN с ядрами ^{1}H в молекуле полимера. По полученным данным была определена степень разветвления полимера, которая составила 0,47.

Литература

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

УДК 551.51

Исследование изменчивости характеристик тропопаузы в арктической зоне по данным радиозондирования

С.А. Шаркова, М.Ю. Червяков

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Изменение характеристик тропопаузы косвенно зависит от потоков тепла в верхней и нижней тропосфере и нижней стратосфере [1, 2]. Информация об изменении структуры полярной тропопаузы имеет большое значение в условиях меняющегося климата арктического региона.

Тропопаузой называется переходный слой между тропосферой и стратосферой. Условно за тропопаузу принимается тот уровень тропосферы, на котором вертикальный градиент температуры убывает до 0,2 / 100 м или ниже [2].

Метод аэрологического радиозондирования является основным для изучения характеристик свободной атмосферы. Наблюдения проводятся в 00:00 и 12:00 по Гринвичу, в результате которых получают данные о вертикальном распределении температуры, влажности, направлении и скорости ветра, а также о давлении воздуха.

В работе был использован архив данных радиозондирования для трех станций: Greenland Environmental Observatory at Summit (GEOSummit), аэрологические станции «Черский» и «Нарьян-Мар» за период с 2012 по 2017 гг. Аэрологические данные находятся в свободном доступе на сайте Университета Вайоминга [3]. Для получения профиля вертикального распределения температуры и влажности в Гренландии использовались стандартные радиозонды Vaisala, а на станциях «Нарьян-Мар» и «Черский» – радиозонды типа МРЗ. В ходе работы было проанализировано 3162 подъема. В некоторые сроки данные отсутствуют в связи с отсутствием наблюдений или ограничением малой высоты подъема радиозонда.

В ходе исследования был проанализирован ход высоты нижней границы тропопаузы. В результате была выявлена зависимость изменения высоты тропопаузы от месяца года, синоптических условий и времени запуска радиозонда. Так, на станции GEOSummit в рассматриваемый период была отмечена максимальная высота тропопаузы в июле 2012 года (13,3 км), с температурой –66,5°С и минимальная высота в августе 2013 года (6,3 км), с

температурой –42,7°С. Сезонная амплитуда высоты нижней границы тропопаузы составляет 2 км. Наиболее часто встречающаяся температура на нижние границы тропопаузы за рассматриваемый период находилась в пределе от –53°С до –59°С. Температура на нижней границе тропопаузы изменяется от –35°С до –68°С. В течение сезона средние значения высоты и температуры равны 10 км и –56°С соответственно.

В ходе анализа данных была выявлена обратная зависимость высоты тропопаузы и значения температуры на этом уровне t = –679–H/200 (в формуле температура в градусах Цельсия, высота в метрах). Следовательно, чем выше расположена тропопауза, тем ниже значения температуры на ней [4].

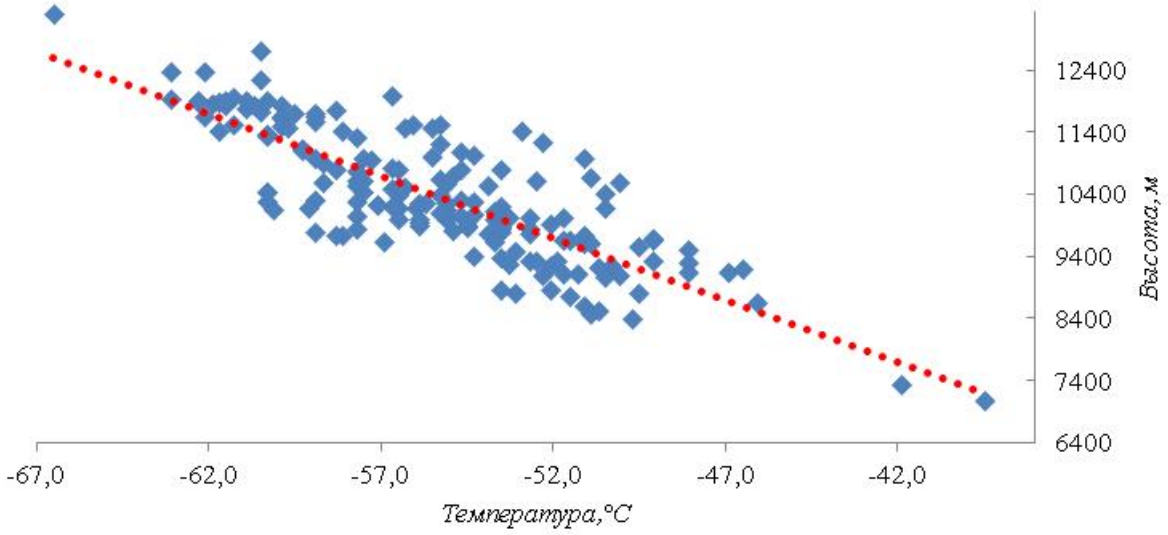


Рис. 1. Связь температуры и высоты тропопаузы для станции Greenland Environmental Observatory at Summit, 2012 год

Работа выполнена в рамках проекта «Академия Арктика».

Литература

1. *Минина Л.С., Маклаков И. А*. Колебания нижней границы тропопаузы в связи с изменением температуры. Труды ЦИП. Вып. 137. 1964.
2. Российский гидрометеорологический энциклопедический словарь / под ред. А.И. Бедрицкого. СПб. – М.: Летний сад, 2009. - Т. 3. С. 21, 131.
3. University of Wyoming College of Engineering [Электронный ресурс]: URL: http://weather.uwyo.edu/upperair/sounding.html
4. *Шаркова С.А., Червяков М.Ю*. Изменение характеристик полярной тропопаузы в летний период по данным радиозондирования // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2018» / Отв. ред. И.А. Алешковский, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов. [Электронный ресурс] — М.: МАКС Пресс, 2018. — 1 электрон. опт. диск (DVD-ROM); 12 см. - Систем. требования: ПК с процессором 486+; Windows 95; дисковод DVD-ROM; Adobe Acrobat Reader. – 1450 Мб. – 11 000 экз.

УДК 537.862

Амплитудно-частотные характеристики воздушно-резонансных трансформаторов Н. Тесла и классическая модель возникновения в них колебательных процессов

И.С. Макаров, А.А. Орлов, В.Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время в ряде работ [1, 2, 3] описываются резонансные явления, происходящие в воздушно-резонансном трансформаторе Н.Тесла (ВРТ), и изучаются процессы колебаний тока и напряжения во вторичном контуре трансформатора Тесла в приближении последнего длинной линией с емкостной нагрузкой. На основании такого приближения заявляется наличие пучности стоячей волны на концентраторе вторичного контура ВРТ, чем объясняется появление весьма

высокого напряжения 10^5–10^6 В на концентраторе. При возникновении стоячих волн должны существовать кратные гармоники возбуждающего сигнала $\omega_n = \omega_0(\frac{1}{2}+n)$, приводящие к резонансу амплитуды сигнала во вторичном контуре. Задачей настоящей работы являлось исследование амплитудно-частотных характеристик воздушно-резонансных трансформаторов Тесла с последующим моделированием процессов возникновения высоковольтного сигнала во вторичной обмотке.

Длинная линия – модель линии передачи, продольный размер которой превышает длину волны, распространяющейся в ней, а поперечные размеры значительно меньше длины волны. Характерной особенностью длинной линии является проявление интерференции двух волн, распространяющихся навстречу друг другу. Одна из волн создается подключенным ко входу линии генератором и называется падающей. Другая волна называется отражённой и возникает из-за частичного отражения падающей волны от нагрузки на выходе длинной линии. Данная система может быть описана двумя однородными волновыми уравнениями $\frac{d^2U}{dz^2}+\gamma^2U=0$ и $\frac{d^2I}{dz^2}+\gamma^2I=0,$ где U, I – ток и напряжение соответственно, $\gamma=\sqrt{Z_1Y_1}$ – коэффициент распространения волны вдоль длинной линии, Z_1 и Y_1 – комплексные сопротивление и проводимость соответственно. Итоговым частным решением при введении начальных условий со стороны генератора будет являться система равенств

$$\begin{cases} U = U_H \mathrm{ch}(\gamma z) + I_H W \mathrm{sh}(\gamma z) \\ I = I_H \mathrm{ch}(\gamma z) + \frac{U_H}{W}\mathrm{sh}(\gamma z) \end{cases} \qquad (1)$$

В воздушно-резонанстном трансформаторе в качестве длинной линии рассматривается вторичная обмотка. Для описания процессов в ВРТ применимы два частных случая решений системы (1) – для разомкнутой линии и для линии с емкостной нагрузкой. В обоих случаях максимум амплитуды напряжения вызывается появлением стоячих волн, условием возникновения которых является связь длины линии L с длиной волны возбуждения $L=\frac{\lambda}{4}+n\frac{\lambda}{2}$.

В экспериментальной части работы исследовались АЧХ катушек с параметрами, приведенными в табл. 1.

Возбуждение колебаний в первичном контуре осуществлялось подачей на нее прямоугольных импульсов со скважностью 0,5. Зависимости коэффициентов усиления ВРТ от частоты возбуждающего сигнала приведены на рис. 2.

Для каждого воздушно-резонансного трансформатора наблюдается семейство параметрических резонансов, которое с хорошей точностью может быть описано следующим соотношением: $f_n=\frac{f_0}{2n+1}$. Резонансных частот для ВРТ выше собственной частоты не наблюдается. Нужно заметить, что амплитуда резонансных пиков линейно зависит от частоты.

На основании полученных результатов воздушно-резонансный трансформатор Тесла рассматривается как RLC – колебательный контур с высокой добротностью, возбуждаемый прямоугольными импульсами в первичной обмотке, что вызывает ЭДС индукции во вторичной обмотке, к которой параллельно подключена емкость (в наших случаях – тор). Однако емкость тора много больше емкости самой катушки, поэтому можно пренебречь емкостью тора.

Расчетный коэффициент усиления в такой модели $\alpha=\frac{U_{\text{макс}}}{U_{\text{возб}}}=\frac{1}{L_{\text{рез}}C}\frac{1}{2\omega_0\gamma}=\frac{1}{\omega_0 RC}\approx 175$ при $L_{\text{рез}} \approx 30$ мГн, $R \approx 100$ Ом, $C \approx 100$ пФ, а создав импульсы временами фронта и среза $\tau_{\text{фр}} \approx \tau_{\text{ср}} \approx 10$ *нс* и с током 10 А можно добиться максимальной амплитуды напряжения на тороиде $U_{\text{макс}} = \alpha \cdot U_{\text{возб}} \approx 250\ 000$ В.

Таблица 1

Характеристики катушек

№	R, Ом	L, мГн	Число витков	$f_{собств}$, кГц
1	106,6	30,42	1060	88,5
2	232,7	30,48	890	89,0
3	18,6	5,67	947	199,2

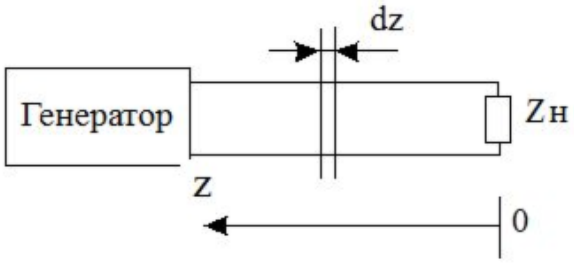


Рис. 1. Двухпроводная длинная линия

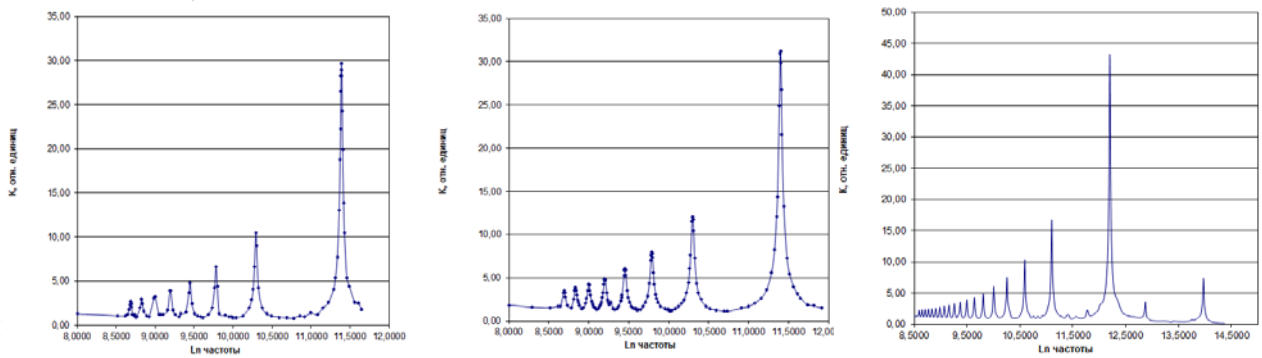


Рис. 2. Зависимость коэффициента усиления от логарифма частоты возбуждающего сигнала для катушек 1, 2, 3 (слева направо)

Литература

1. *Стребков Д.С.* Никола Тесла и современные проблемы электроэнергетики // Электро. 2006. № 3.С. 47–53.
2. *Верин О.Г.* Теория трансформатора Тесла // Доклады НА. 2012. № 20. С. 146-154
3. *Стребков Д.С., Некрасов А.И.* Резонансные методы передачи и применения электрической энергии. М.: ГНУ ВИЭСХ, 2008. 352 с.

УДК 536.421.4

Поиск парадокса Мпембы в процессе замерзания воды

А.Е. Грязев[1]***, Д.А. Панасюк***[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Tampere University of Technology

Парадоксом Мпембы принято называть более быстрое замерзание изначально горячей воды по сравнению с изначально холодной водой в сходных условиях охлаждения. В то время как большая часть работ, посвященных этому явлению, сфокусированы на процессе охлаждения, например [1], в данной работе рассматривается исключительно замерзание. А именно проверке подлежало наличие разницы в удельных теплотах фазового перехода для «быстро» охлаждённой воды (~10 мин) и изначально холодной (~3 ºС), а также наличие разницы в коэффициентах теплопроводности.

Для определения относительной теплоты фазового перехода был использован стальной шар диаметром 5 см в качестве теплового резервуара. В центр шара была помещена термопара. В начале он охлаждался в сосуде с жидким азотом (момент окончания охлаждения фиксировался с помощью термопары: показания выходили на асимптоту), после чего помещался в предварительно

охлаждённую до 0 ºС воду. На поверхности шара намерзал лёд, в то время как шар нагревался. Момент окончания нагрева шара так же фиксировался с помощью термопары (второй спай помещался в льдоводяную смесь). По окончании процесса намерзания шар взвешивался на электронных весах. Вычитая массу шара (с термопарой и подвесом), можно определить массу намерзшего льда. Несмотря на высокую абсолютную погрешность метода измерения теплоты таким образом, относительная погрешность будет достаточной (менее 1%). Вода, над которой проводились измерения, была дистиллированной. Во время намерзания на шар, она находилась в сосуде, на стенках которого был лёд из этой же воды, чтобы не допустить её значительного нагрева относительно температуры фазового перехода (которая, разумеется, была близка к 0 ºС, но не равнялась ему в точности).

До измерений вода хранилась в стеклянной таре, в которой потом же и нагревалась, и охлаждалась для проведения опытов с «быстро» охлаждённой водой. Следует отметить, что вода не подвергалась дегазации. Это важно, т.к. в одной из работ, посвящённых данному феномену [2], отмечалось сильное влияние наличия растворённого CO_2. Нагрев производился до 75 ºС, после чего в течение времени порядка 10 минут вода охлаждалась до комнатной температуры путём помещения тары в льдоводяную смесь. Такой способ был предпочтительнее, например, погружения в азот, т.к. в оригинальной работе [3], как и в большинстве других, рассматривалось охлаждение в морозильной камере, в то время как ускорение охлаждения могло изменить возможные процессы, приводящие к парадоксу.

В табл. 1 можно видеть результат одной из серий опытов. В пределах погрешности средняя масса льда *одинакова* для изначально холодного и «быстро» охлаждённого состояния воды. Следует отметить, что наблюдение парадокса ожидалось в виде разницы не менее нескольких процентов, во-первых, потому что в оригинальной работе [3] разница была в десятки процентов, а во-вторых, из-за того, что наши первые и гораздо более грубые опыты по наблюдению этого парадокса при замерзании показывали его наличие с масштабом около 10%.

Основная часть работ, посвящённых парадоксу, была написана в период с мая 1969 [3] по декабрь 2016 гг. [1]. В научном сообществе не сложилось однозначной интерпретации сущности явления: из 22 рассмотренных работ в двенадцати ([1–12]) из них исследуется время, требуемое воде на охлаждение до 0 ºС. В двух ([13], [14]) авторы изучают и охлаждение и замерзание изначально холодных и изначально горячих образцов воды. Лишь в оставшихся восьми ([15] – [22]) работах парадокс рассматривается так же, как в данной (исключительно замерзание). Кроме того, в работах прослеживаются явные тенденции: в период с 1969 года и по 2010 год есть всего две работы, затрагивающие тему замерзания ([13], [14]), все остальные же исследуют только охлаждение. В то время как начиная с 2011 года и работы [15] рассматривалось исключительно замерзание воды с различной стартовой температурой, за исключением работы [1]. Подавляющее большинство авторов (все, кроме [1], [19]) пришло к выводу, что парадокс Мпембы наблюдается вне зависимости от того, какой именно процесс изучался: охлаждение, замерзание или же оба.

Таблица 1

Результаты одной из серий опытов

	Холодная					*Горячая*			
Опыт	1	2	3	4	*Средняя*	1	2	3	*Средняя*
M,г	104	102,6	103,7	103,0	**103,3**	103,7	103,2	103,6	**103,5**
dM, г	0,7	0,7	0,7	0,7	0,3	0,3	0,3	0,3	0,2

Литература

1. *Henry C.B., Paul F.L.* Questioning the Mpemba effect: hot water does not cool more quickly than cold // Scientific Reports 2016.
2. *Freeman M.* Cooler still – an answer?// Phys. Educ. 1979. 14. 417.
3. *Mpemba E.B., Osborne D.G.* Cool? // Phys. Educ. 1969. 4172.
4. *Ian F.* Cooler?// Phys. Educ., 1971. 6. 32.
5. *Deeson E.* Cooler - lower down // Phys. Educ. 1971. 6. 42.
6. *Walker J.* Hot water freezes faster than cold water. Why does it do so?// Scientific American. 1977. Vol. 237. Issue 3.
7. *Osborne D.G.* Mind on ice// Phys. Educ. 1979. Vol. 14.
8. *Monwhea J.* The Mpemba effect: When can hot water freeze faster than cold?// Am. J. Phys. 2006. 74. 6.
9. *Gholaminejad A., Hosseini R.* A study of water supercooling//Journal of Electronics Cooling and Thermal Control.

2013. 3. 1–6.
10. *Auerbach D.* Supercooling and the Mpemba effect: When hot water freezes quicker than cold// Am. J. Phys. 1995. 63 (10).
11. *Maija A.* Investigation into the freezing of liquids// Phys. Educ. 1969. 4. 379.
12. *Katz J. I.* When hot water freezes before cold// Am. J. Phys. 2009. 77. 27.
13. *Kell G.S.* The Freezing of Hot and Cold Water// Am. J. Phys. 1969. 37. 564
14. *Maciejewski P.K.* Evidence of a Convective Instability Allowing Warm Water to Freeze in Less Time Than Cold Water// Journ. of Heat Transfer. 1996. Vol. 118 / 65.
15. *Brownridge J.D.,* When does hot water freeze faster then cold water? A search for the Mpemba effect // Am. J. Phys. 2011. Vol. 79. N. 1.
16. *Jaehyeok J., William A.* Mechanisms Underlying the Mpemba Effect in Water from Molecular Dynamics Simulations// J. Phys. Chem. C. 2015. 119. 2622−2629.
17. *Yunwen T., Wenli Z., Junteng J., Wei L., Dieter C.* The Different Ways of Hydrogen Bonding in Water. Why Does Warm Water Freeze Faster than Cold Water?// J. Chem. Theory Comput. 2017. 13 (1). P. 55–76.
18. *Vynnycky M., Mitchell S. L.* Evaporative cooling and the Mpemba effect// International Journal of Heat Mass Transfer. 2010. 46:881–890.
19. *Vynnycky M., Maeno N.* Axisymmetric natural convection-driven evaporation of hot water and the Mpemba effect// International Journal of Heat and Mass Transfer. 2012. 55. 7297–7311.
20. *Zhang X.,Huang Y.,Ma Z., Sun C.Q.* O:H-O Bond Anomalous Relaxation Resolving Mpemba Paradox// PCCP. 2014. 16(42): 22995–23002.
21. *Vynnycky M., Kimura S.* Can natural convection alone explain the Mpemba effect?// International Journal of Heat and Mass Transfer. 2015. 80. 243–255.
22. *Ahn Y.-H., Kang H., Koh D.-Y., Lee H.* Experimental verifications of Mpemba-like behaviors of clathrate hydrates// Korean J. Chem. Eng. 2016. 33: 1903.

УДК 538.913

Применение алгоритма Метрополиса с использованием имитации ударной волны для моделирования наночастиц сплава Cu–Ni

К.М. Кызыл-оол, Г.И. Лапушкин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Наночастицы сплавов могут проявлять магнитные, каталитические и оптические свойства, причем свойства могут сильно отличаться от таковых для обычных сплавов. Интерес к наночастицам Cu–Ni различного состава обусловлен его каталитическими свойствами. Было, например, показано [1], что сплавы Cu–Ni с развитой поверхностью имеют заметно большую каталитическую активность при окислении CO, чем чистые никель или медь. Подобные сплавы также успешно были использованы для каталитического роста графена [2].

Сложность задачи заключается в том, что для наночастиц, содержащих всего несколько тысяч атомов (и даже менее), обычный термодинамический расчёт неприменим, а поиск минимума свободной энергии простым перебором затруднён в силу большого объёма расчетов, поэтому применяются различные способы ускорения сходимости расчётов. Наночастицы из меди и никеля в различных соотношениях были детально изучены в работе [3], там использована довольно сложная расчётная модель и успешно получены результаты по расчёту таких микрокристаллов. Недостатком этой работы, на наш взгляд, является то, что высокая степень сложности модели часто существенно ограничивает её применимость.

Целью нашей работы была попытка попробовать выполнить расчёты, аналогичные [3], но с помощью существенно более простой модели, и в случае успеха сравнить расчётные данные с экспериментальными. Модель, которую мы использовали, подробно описана в работах [4, 5].

Расчёт по заданной конфигурации наночастицы из атомов Ni и Cu моделирует релаксацию методом Монте-Карло, используя парный потенциал Морзе. В основе алгоритма моделирования используется алгоритм Метрополиса. На рис. 1 показаны результаты расчетов в сравнении этих двух моделей, в обоих случаях содержатся 434 атома в наночастице.

Были проделаны расчеты в широком диапазоне составов сплава, результат приведен в табл. 1. Для сравнения приведены экспериментальные данные по сплавам такого состава из работы [6]. Измерения проводились с помощью двойной дифференциальной термоячейки.

На рис. 2 данные представлены графически, по оси X нанесены измеренные значения активности меди, по оси Y – расчётные величины. Видно, что для концентраций Cu 0,5 и более точки с хорошей точностью ложатся на прямую, тангенс угла наклона близок к 1 и тренд проходит почти через точку 0.

В то же время для малых концентраций Cu отличие от этого тренда заметные. Также важно то, что измерения в термоячейке проводились в сравнении сплава Ni/Cu с чистым Ni, таким образом сплавы с низким содержанием Cu давали низкое ЭДС (табл. 1), что снижало точность пересчёта ЭДС ячейки в активность Cu, это хорошо заметно при анализе результатов [6].

Таким образом, поведение кривых получает ясное логичное объяснение. В экспериментальных работах [6] активность сравнивали со средней концентрацией металла в наночастице, что не совсем корректно. Мы считаем, что более правильно сравнивать её именно с концентрацией металла на поверхности.

Таблица 1

Результаты расчетов и сравнение с экспериментом. Величина XP_{Cu} была рассчитана для среднего количества атомов меди в двух внешних слоях.

Доля меди в сплаве X_{Cu}	ЭДС ячейки	Активность меди A_{cu}	Величина A_{Cu}/X_{Cu}	Расчет доли меди во внешнем слое XP_{Cu}	Величина XP_{Cu}/X_{Cu}
0,9	50,5	0,91	1,01	0,962	1,07
0,8	30,8	0,85	1,06	0,924	1,16
0,7	22,1	0,79	1,13	0,884	1,26
0,5	12,4	0,69	1,38	0,748	1,50
0,3	7,9	0,59	1,97	0,510	1,70
0,2	6,1	0,51	2,55	0,337	1,69

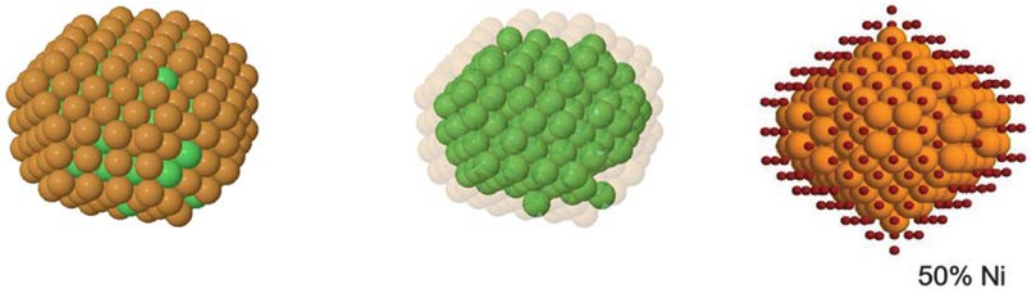


Рис. 1. Результаты расчета. Слева направо: внешний вид наночастицы, содержащей 50% Ni, оранжевым показаны атомы меди; внутренний вид той же наночастицы, атомы меди полупрозрачные, атомы Ni зелёные; результат расчета по более сложной модели из работы [3], атомы меди показаны точками, атомы никеля – оранжевыми шариками

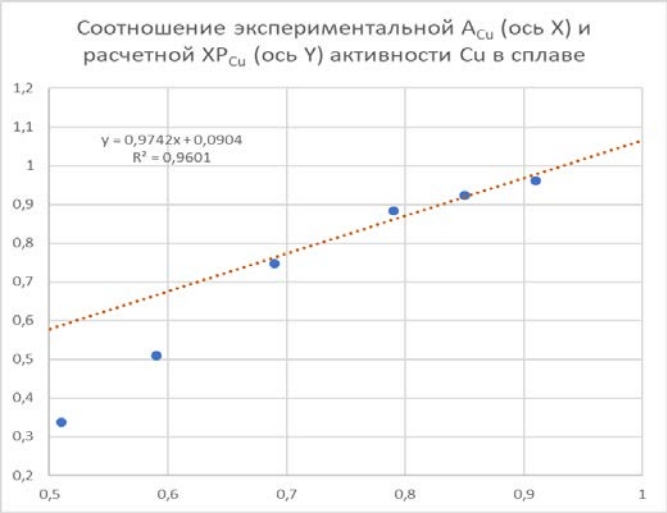


Рис. 2. Соотношение экспериментально измеренной активности меди для наночастиц разного состава и приповерхностной концентрации меди согласно нашим расчётам

Литература

1. *Vesselli E., Monachino E., Rizzi M.*, ets. Steering the Chemistry of Carbon Oxides on a NiCu Catalyst // ACS Catal. 2013. V. 3. P. 1555.
2. *Chen S., Cai W., Piner R. D., ets.* Synthesis and Characterization of Large-Area Graphene and Graphite Films on Commercial Cu-Ni Alloy Foils // Nano Lett. 2011. V. 11. P. 3519.
3. *Panizon E., Jimena A.O., Peressib M., ets.* Study of structures and thermodynamics of CuNi nanoalloys using a new DFT-fitted atomistic potential // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. V. 17. P. 28068.
4. *Красильников М.П., Кызыл-оол К.М.* Модификация алгоритма метрополиса моделирования наносплава имитацией ударной волны // Региональная экономика: технологии, экономика, экология и инфраструктура Материалы 2-й Международной научно-практической конференции. 2017. С. 244–250.
5. *Кызыл-оол К.М., Красильников М.П.* Программа решёточного имитационного моделирования упрочения наносплава ударной волной: Свид-во о гос. регистрации программ для ЭВМ N. 2017615239. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10.05.2017 г.
6. *Stricans S., Jacob K.T.* Thermodynamic properties of Cu-Ni alloys: measurements and assessment// Materials Science and Technology. 1989. V. 5. P. 427.

УДК 538.9

Уточнение вероятностной модели перемешивания диффундирующих частиц

М.Е. Гайченков

Рассматривается одномерный ансамбль N диффундирующих частиц одного размера (система, широко применяемая для разработки моделей переноса коллоидных и биологических частиц в узких каналах [1, 2]) с использованием ряда инверсий для определения степени перемешивания частиц смеси. Предполагается, что N диффундирующих частиц расположены на прямой, $x_k(t)$ — координата k-й частицы, $k = 1,...,N$. Взаимное расположение частиц описывается перестановкой $j_1,...,j_N$ чисел $1,...,N$: имеется в виду, что в момент t выполняются неравенства $x_{j_1}(t) < x_{j_2}(t) < ... < x_{j_N}(t)$. При $t = 0$ перестановка тождественная: $x_1(t) < x_2(t) < ... < x_N(t)$. В статье [3] отмечается, что исследование модели проводилось с использованием «гауссиана» для бесконечного числа частиц. Используя результаты работы российского математика В. В. Петрова об асимптотическом разложении для центральной предельной теоремы [4, с. 167 и далее], удалось получить гауссиан для конечного числа N с заданной точностью. В асимптотических формулах нечетные моменты высших порядков равны нулю. Функция распределения F_N для конечного числа частиц имеет вид

$$F_N(x) = \Phi(x) + \frac{3}{50\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} (x^3 - 3x) \frac{6N^3 + 21N^2 + 31N + 31}{N(2N+5)^2(N-1)} + O(\frac{1}{N^2}).$$

При бесконечно большом числе частиц распределение представимо функцией Лапласа $\Phi(x)$.

Полученная функция распределения связана с числами МакМагона [5, 6, 7]. Унимодальное поведение этих чисел предполагает асимптотически нормальное распределение инверсий в случайной перестановке [8]. Более того, Э. Бен-Наим отмечает, что распределение МагМагона становится функцией одной переменной для большого числа элементов (частиц в терминах работы [3]) и подчиняется нормальному распределению. Найденная функция распределения для конечного числа элементов зависит от двух переменных и переходит для больших N в нормальный закон распределения. Результат учитывает информацию о свойствах чисел. Например, отношение чисел $a(n+1)/a(n)$ последовательности [6] в пределе при $n \to \infty$ представимо в виде $n+1/2+O(1/n^{(1-\varepsilon)})$. Автор признателен Ричарду Стэнли за комментарии относительно использования вероятностной модели при доказательстве указанного свойства.

Литература

1. *Wei Q.H., Bechinger C., and Leiderer P.* // Science. 2000. 287. 625.
2. *Cui B.X., Diamant H., and Lin B.H.* // Phys. Rev. Lett. 2002. 89. 188302.
3. *Ben-Naim E.* Mixing of diffusing particles // Phys. Rev. E. 82. 061103.
4. *Петров В.В.* Суммы независимых случайных величин. М.: Наука, 1972. – 416 с.
5. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, http://oeis.org/A008302
6. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, http://oeis.org/A000140
7. The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, http://oeis.org/A181609

Margolius B.H. Permutations with inversions // J. Integ. Seqs. 2001. Vol. 4. #01.2.4.

СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Председатель: А.В. Арсенин (к.ф.-м.н.)

Зам. председателя: В.С. Волков

Секретарь: И.А. Храмцов

Дата: 20.11.2018

Время: 10:00-15:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр 3, ауд. 119 ГК, МФТИ

УДК 535.371

Механизмы передачи и релаксации электронного возбуждения в комплексах Sm(III) с лигандным окружением из класса β-дикетонатов

***Д.А. Комиссар*[1], *М.Т. Метлин*[2], *С.А. Амброзевич*[1,2,4], *А.С. Тобохова*[1,2], *И.В. Тайдаков*[1,2], *Ю.А. Белоусов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
[4]Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

В работе изучены люминесцентные свойства β-дикетонатных комплексов на основе иона Sm(III). С помощью спектроскопических измерений удалось установить структуру энергетических уровней и переходы, принимающие участие в люминесценции редкоземельного иона.

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 (1–3) в видимой (рис. 1) и инфракрасной (рис. 2) спектральных областях наблюдались несколько максимумов. Наиболее интенсивные полосы люминесценции комплексов лежат в областях 650 нм и 950 нм, что соответствует переходам $^4G_{5/2} \rightarrow {}^6H_{9/2}$ (648 нм) и $^4G_{5/2} \rightarrow {}^6F_{5/2}$ (952 нм) в ионе Sm(III) [4].

При исследовании временных зависимостей релаксации люминесценции соединений самария(III) (рис. 3) с помощью деконволюции экспериментальных данных методом Левенберга–Марквардта были выделены два элементарных процесса затухания с характерными временами 10 мкс и 50 мкс. Длительная компонента, скорее всего, соответствует процессу передачи электронного возбуждения на ион Sm(III) и его люминесценции, а короткое время, по-видимому, соответствует флуоресценции лиганда.

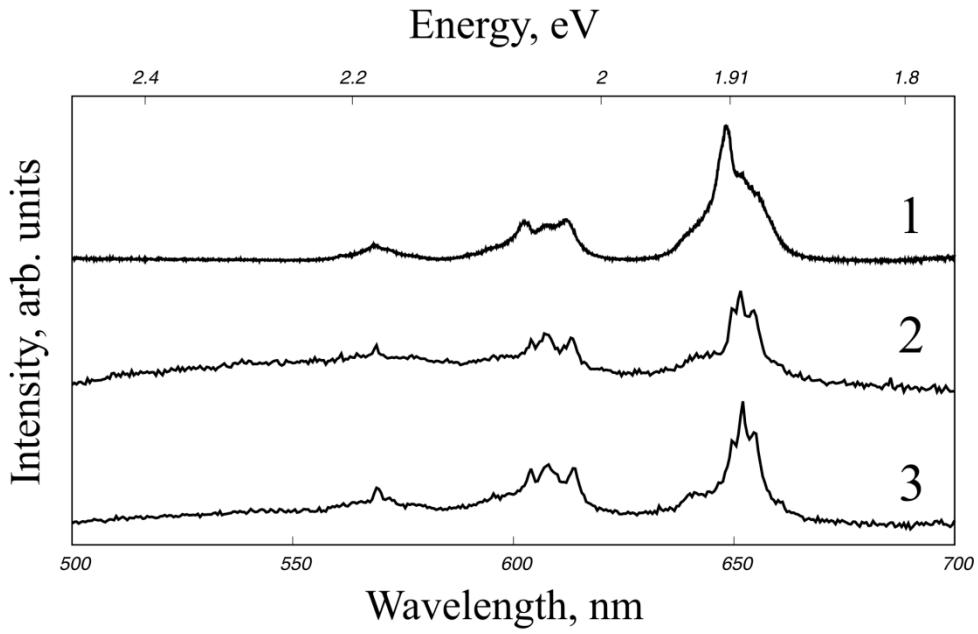


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции различных металлоорганических комплексов на основе иона Sm(III) (1–3) при оптическом возбуждении 365 нм (3.4 eV)

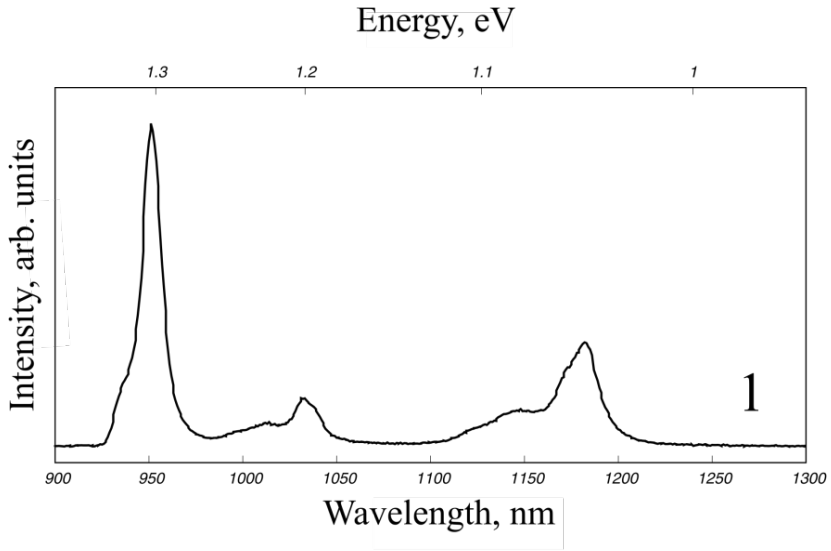


Рис. 2. Спектр фотолюминесценции металлоорганического комплекса 1 в ИК области при оптическом возбуждении 355 нм (3.49 eV)

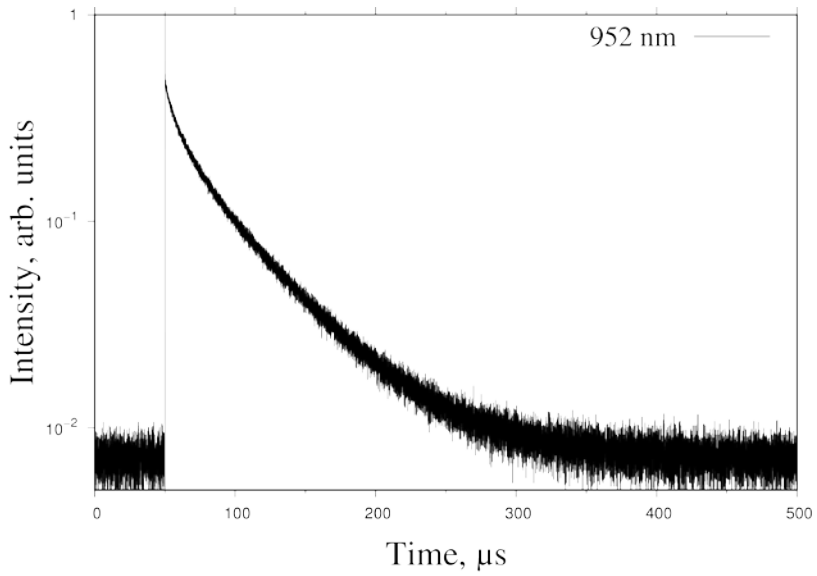


Рис. 3. Временные зависимости интенсивности люминесценции при импульсном возбуждении 355 нм (3.49 eV) комплекса 1 при регистрации в области 952 нм

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. *Pushkarev A.P., Yablonsky A.N., Yunin P.A., Burin M.E., Andreev B.A., Bochkarev M.N.* Features of spectral properties of Sm3 + complexes with dithia- and diselenophosphinate ligands // Spectrochim. Acta, Part A. 2016. V. 163. P. 134 – 139.

УДК 538.958, 538.97

Проявление магнитоплазменных колебаний в 2D электронном газе в поглощении электромагнитных волн

Д.А. Родионов, И.В. Загороднев

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрено прохождение монохроматической плоской электромагнитной (ЭМ) волны в двух поляризациях (*s*-поляризация – вектор напряжённости электрического поля перпендикулярен плоскости падения, *p*-поляризация – параллелен) через двумерный электронный газ (2DЭГ) в постоянном магнитном поле с проводимостью в модели Друде. Коэффициент поглощения для *s*-поляризации имеет вид

$$A_s = \frac{2\alpha \sec\theta\left[\left(1+\alpha\cos\theta\right)^2+\Omega_c^2+\Omega^2\right]}{\left[\left(1+\alpha\cos\theta\right)^2+\Omega_c^2+\Omega^2\right]\left[\left(1+\alpha\sec\theta\right)^2+\Omega_c^2+\Omega^2\right]-4\left(\Omega_c\Omega\right)^2-\left(\Omega_c\alpha\right)^2\left(\cos\theta-\sec\theta\right)^2}. \quad (1)$$

Здесь θ – угол падения электромагнитной волны, отсчитываемый от нормали к 2DЭГ; $\alpha = 2\pi\sigma_0 / c$ – статическая проводимость Друде $\sigma_0 = n_s e^2\tau / m$, где n_s – концентрация электронов в 2DЭГ, τ – время релаксации, e – элементарный заряд ($e>0$), m – масса электрона; $\Omega = \omega\tau$ – приведенная частота падающей волны; $\Omega_c = \omega_c\tau$ – приведённая циклотронная частота $\omega_c = eH/(mc)$, где H – внешнее постоянное магнитное поле, c – скорость света в вакууме. Для *p*-поляризации выражение коэффициента поглощения получается при замене $\cos\theta \to \sec\theta$ в (1).

Косинус угла, доставляющего максимум поглощения в s-поляризации, при $\Omega << 1$, $\Omega_c << 1$ может быть найден по формуле

$$\cos\theta_s = \alpha\left[1 - \frac{1+5\alpha^2+3\alpha^4-\alpha^6}{\left(1+\alpha^2\right)^4}\Omega_c^2\right] + o(\Omega_c^4), \tag{2}$$

где $1+5\alpha^2+3\alpha^4-\alpha^6 > 0$ при $\alpha \in [0;1]$. При $\Omega << 1$ и $\Omega_c >> 1+\alpha^2$

$$\cos\theta_s = \frac{\alpha}{\Omega_c^2} - \frac{\alpha\left(1+\alpha^2\right)}{\Omega_c^4} + o\left(\frac{1}{\Omega_c^6}\right). \tag{3}$$

Установлено, что полюса оптических коэффициентов не связаны с плазмонами из работы [1]. Ноль знаменателя любого оптического коэффициента совпал бы с дисперсионным соотношением, описывающим плазменные колебания из [1], если бы $\cos\theta$ был бы равен $i\beta c/\omega$, где $\beta = \sqrt{q^2-\omega^2/c^2}$, а q – волновой вектор плазмона $q = \omega\sin\theta/c$ (из закона сохранения импульса вдоль плоскости 2DЭГ). Для анализа собственных мод 2DEG ветвь корня, определяющая β, выбирается с условием $\mathrm{Re}(\beta) \geq 0$. Это приводит к условию $\mathrm{Im}(\beta) \geq 0$, следовательно, выражение $i\beta c/\omega$ не может определять косинус (реального) угла падения.

Для удобства сравнения с результатами работы [1] на рис. 1 и рис. 2 приведены контурные графики коэффициента поглощения в зависимости от частоты и проекции волнового вектора ЭМ-волны на плоскость 2DЭГ, q. Несмотря на то, что закон дисперсии плазмона не определяет полюса оптических коэффициентов, на приведенных рисунках видно соответствие между законом дисперсии магнитоплазмона из [1] с максимумом коэффициента поглощения s-поляризованной ЭМ-волны (в фазах S1 и S2), что свидетельствует о возбуждении плазмона.

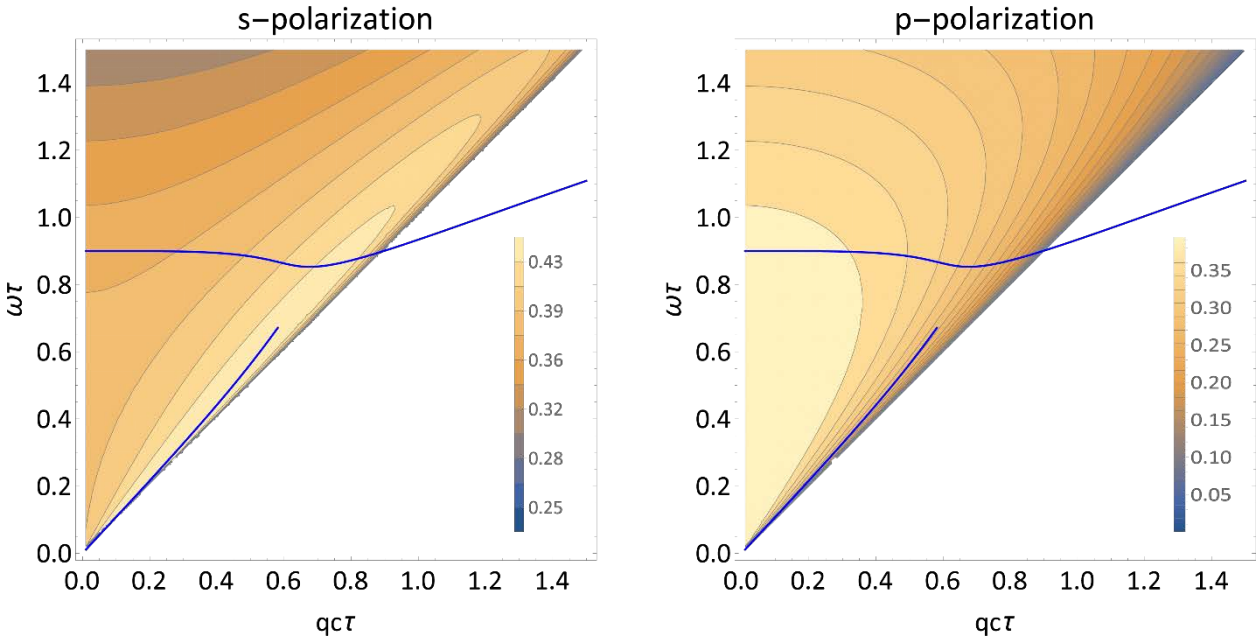


Рис. 1. Зависимость коэффициента поглощения от проекции волнового вектора q, умноженного на скорость света c и время релаксации τ, падающей ЭМ волны и её частоты $\omega\tau$ при циклотронной частоте $\omega_c\tau = 0,9$ и обезразмеренной на скорость света статической проводимости $\alpha = 2\pi\sigma_0/c = 0,8$.

Сплошные (синие) линии – спектр плазмона из [1] (в S1-фазе)

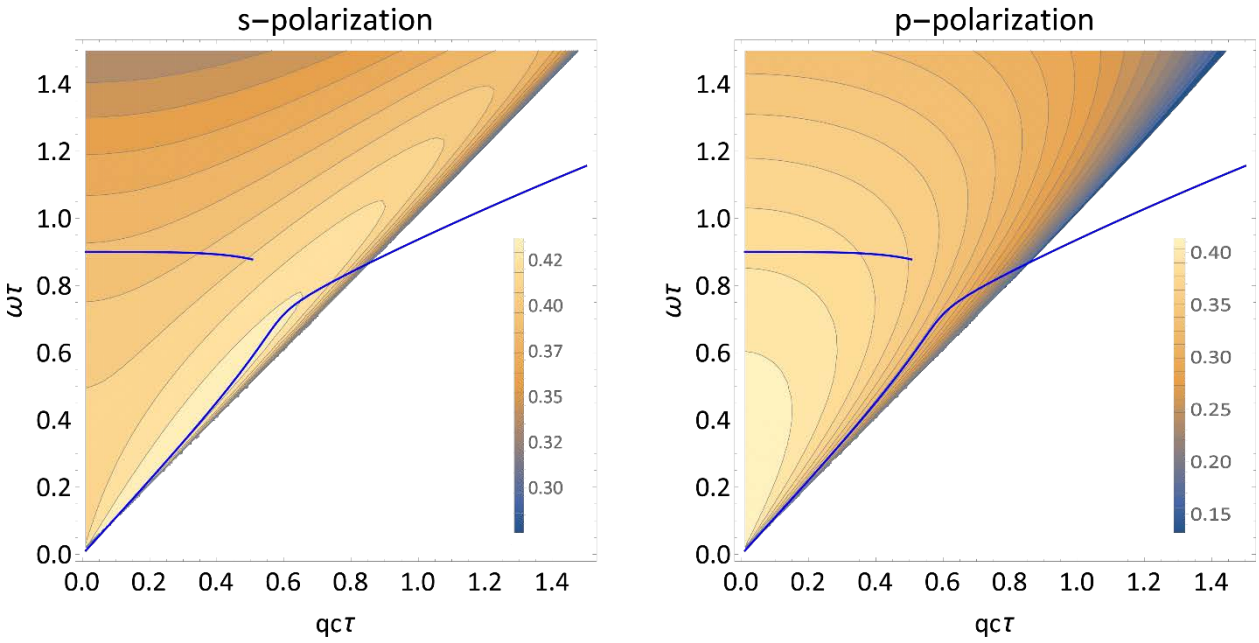


Рис. 2. Зависимость коэффициента поглощения от проекции волнового вектора $qc\tau$ падающей ЭМ-волны и её частоты $\omega\tau$ при $\omega_c\tau = 0,9$ и $\alpha = 2\pi\sigma_0 / c = 0,98$. Сплошные (синие) линии – спектр плазмона из [1] (в S2-фазе)

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 16-12-10411.

Литература

1. *Volkov V.A., Zabolotnykh A.A.* Undamped relativistic magnetoplasmons in lossy two-dimensional electron systems // Phys. Rev. B 94. 2016. P. 165408.
2. *Fal'ko V.I. and Khmel'nitskii D.E.* What if a film conductivity exceeds the speed of light? // Zh. Eksp. Theor. Fiz. 1988 (1989). 95. P. 1150–1152.

УДК 537.9, 538.958

Полевые транзисторы на основе графена и металлических наночастиц для создания фотодетекторов видимого и инфракрасного диапазона

***К.В. Воронин*[1], *Г.А. Ермолаев*[1,2], *А.Н. Былинкин*[1], *Ю.В. Стебунов*[1], *А.В. Арсенин*[1], *В.С. Волков*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Университет Южной Дании

Создание компактного широкополосного фотодетектора с малым временем фотоотклика для ближнего и среднего инфракрасного диапазона – актуальная задача современной физики. Такие фотодетекторы могут применяться для сверхбыстрого и сверхчувствительного детектирования, спектроскопии и коммуникаций. Сейчас для создания таких приборов используются графен и другие двумерные материалы за счет их способности поглощать электромагнитное излучение от ультрафиолетового до терагерцевого диапазона частот. Принцип действия приборов на их основе заключается в том, что электроны в графене, поглощая фотоны, могут переходить из валентной зоны в зону проводимости, то есть рождаются электрон-дырочные пары, а значит, изменяется сопротивление, которое и детектируется прибором [1]. Сложность заключается в том, что графен поглощает около 2.3% падающего на него излучения, в результате чувствительность таких

детекторов составляет порядка сотых долей А/Вт. Для усиления фотоотклика используются квантовые точки, хорошо поглощающие оптическое излучение в рассматриваемом диапазоне частот [2], при этом чувствительность составляет до 10^7 А/Вт, однако ширина рабочей области спектра сужается: верхняя граница по длине волны составляет 1000–1600 нм. Также используются металлические наночастицы, которые поглощают детектируемое излучение за счет возбуждения локализованного плазмонного резонанса [3], в таком случае чувствительность меньше – 10^4 А/Вт, но при этом легко получить диапазон детектирования в любой области спектра, подобрав соответствующий размер наночастицы.

В данной работе рассмотрен полевой транзистор (рис. 1а), выполненный на подложке из кремния со слоем термического диоксида кремния толщиной 280 нм, с расположенными на нем золотыми электродами, на которые электрохимическим методом [4] перенесен графен. Сопротивление графена зависит от концентрации носителей зарядов в нем, которой можно управлять, изменяя напряжение на затворе:

$$\Delta n = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{ed}, \qquad (1)$$

где Δn – концентрация электронов в графене (наведенная за счет напряжения на затворе), ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, ε – диэлектрическая проницаемость диэлектрика (SiO_2), d – его толщина, U – напряжение на затворе. Зависимость тока между истоком и стоком транзистора от напряжения на затворе приведена на рис. 1б. При изменении концентрации носителей, то есть изменении напряжения на затворе, изменяется ток между электродами. Максимум сопротивления соответствует случаю, когда концентрация носителей заряда минимальна, то есть когда дираковская точка совпадает с энергией Ферми. Стоит отметить, что на данной зависимости наблюдается гистерезис, связанный в основном с наличием на графене ленгмюровского слоя молекул воды, обладающих дипольным моментом и влияющих на потенциал поверхности. Для достижения заметного изменения тока при облучении светом необходимо увеличить взаимодействие электромагнитного излучения с графеном. С этой целью на графен были нанесены наночастицы золота (со средним диаметром 50 нм). На рис. 2 представлены зависимости тока от напряжения на затворе с наночастицами и без для двух образцов. Видно, что при нанесении наночастиц кривая заметно сдвинулась в область отрицательных напряжений, что подтверждает влияние наночастиц на эффективность взаимодействия электромагнитного излучения с графеном. В докладе будут представлены результаты измерений фототока полевых транзисторов на основе графена с различными металлическими наночастицами, а также перспективы увеличения чувствительности и расширения рабочего диапазона фотодетекторов за счет использования периодических плазмонных структур.

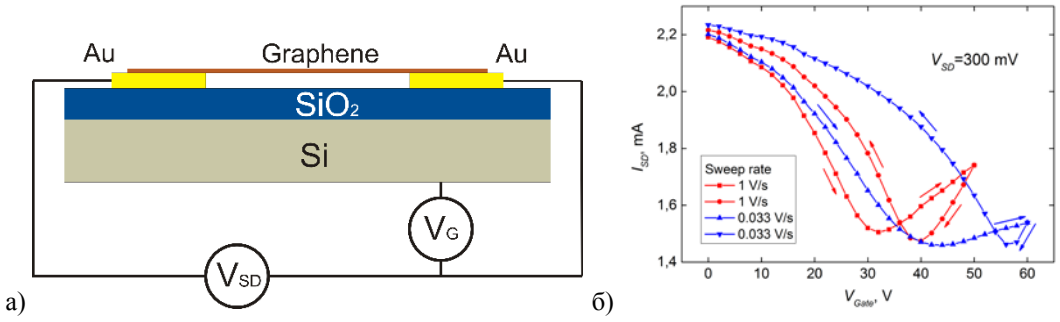


Рис. 1. Схема полевого транзистора на основе графена (а) и зависимость тока между истоком и стоком от напряжения на затворе (б)

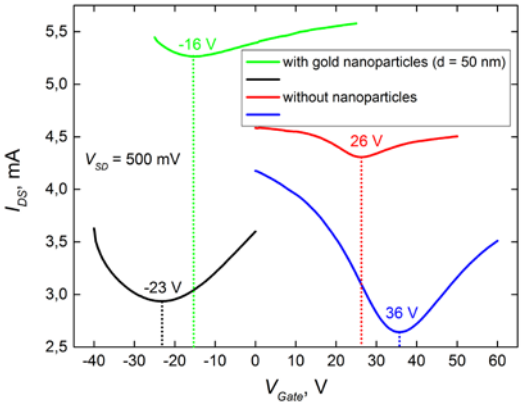


Рис. 2. Зависимость тока между истоком и стоком от напряжения на затворе для двух образцов до и после нанесения наночастиц золота

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-20061 мол_а_вед.

Литература

1. *Park J., Ahn Y.H. and Ruiz-Vargas C.* Imaging of photocurrent generation and collection in single-layer graphene // Nano Letters. 2009. V. 9. P. 1742–1746.
2. *Konstantatos G., Badioli M., Gaudreau, L., Osmond J., Bernechea M., De Arquer F.P.G., Koppens F.H.L.* Hybrid graphene quantum dot phototransistors with ultrahigh gain // Nature Nanotechnology. 2012. V. 7(6). P. 363–368.
3. *Liu Y., Cheng R., Liao L., Zhou H., Bai J., Liu G., Duan X.* Plasmon resonance enhanced multicolour photodetection by graphene // Nature Communications. 2011. V. 2(1). P. 577–579.
4. *Wang Y., Zheng Y., Xu X., Dubuisson E., Bao Q., Lu J. and Loh, K.P.* Electrochemical delamination of CVD grown graphene film: toward the recyclable use of copper catalyst SI // ACS Nano. 2011. V. 12. P. 1–10.

УДК 53.043

Оценка влияния окружающей среды на оптические свойства тонких пленок меди

М.С. Миронов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Если в области электроники медь является фактически основным металлом, то в области нанофотоники (плазмоника, метаматериалы и метаповерхности), где в большинстве случаев рассматриваются незащищенные от окружающей среды системы, медь только начинает привлекать внимание исследователей [1, 2]. Применение тонких пленок меди (20–200 нм) ограничено из-за образования на поверхности оксидной пленки в результате взаимодействия с атмосферным воздухом. Для решения этой проблемы пленки меди покрываются защитными диэлектрическими слоями нанометровой толщины или графеном.

В докладе будут представлены результаты исследования оптического отклика тонких пленок меди (толщиной 50 нм) в атмосферном воздухе с течением времени. Исследования проводились с помощью призменного метода возбуждения поверхностных плазмон поляритонов в классической геометрии, так называемой *геометрии Кретчмана* (рис. 1), в которой реализуется явление поверхностного плазмонного резонанса (ППР) [3]. В используемой схеме луч лазера (1) после поляризатора (2) падает на призму (3) на которой закреплен исследуемый образец – стеклянная пластинка с тонкой пленкой меди (6). Отраженный свет с помощью линзы (4), компенсирующей разность угловых скоростей поворота призмы и поворота отраженного луча, попадает на фотодетектор (5), сигнал с которого поступает на ПК. Поворот призмы осуществляется при помощи наноротатора с компьютерным управлением. В результате на ПК появляются данные о положении наноротатора и уровне сигнала на детекторе, т. е. интенсивность отраженного излучения от угла падения. Наблюдение за окислением медной пленки проводились в течении 24 дней с логарифмическим масштабом во времени.

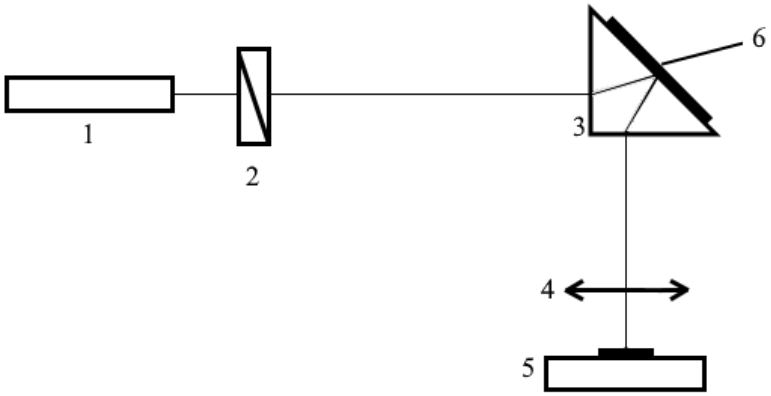


Рис. 1. Принципиальная схема установки возбуждения ППР.

Литература

1. *Fedyanin D.Yu., Yakubovsky D.I., Kirtaev R.V., Volkov V.S.* Ultralow-loss CMOS copper plasmonic waveguides // Nano Letters. 2016. V. 16. P. 362–366.
2. *Stebunov Yu.V., Yakubovsky D.I., Fedyanin D.Yu., Arsenin A.V., Volkov V.S.* Superior sensitivity of copper-based plasmonic biosensors // Langmuir. 2018. V. 34(15). P. 4681–4687.
3. *Kretschmann E.* Die Bestimmung optischer Konstanten von Metallen durch Anregung von Oberflächenplasmaschwingungen // Z. Physik. 1971. V. 241. P. 313–324.

УДК 537.874, 535.42

Расчет дисперсии решеточных плазмонных резонансов

***И.М. Фрадкин*[1,2], *С.А. Дьяков*[2], *Н.А. Гиппиус*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий

Металлы играют важнейшую роль в современной нанооптике, благодаря тому, что плазмонные резонансы, возникающие в металлических наночастицах, позволяют беспрецендентно локализовать свет. Способность преодолеть дифракционный предел обеспечивает значительное усиление взаимодействия света с веществом даже несмотря на крайне низкую добротность резонансов в сравнении с модами в широко распространенных диэлектрических резонаторах. В то же время, резонаторы, работающие в промежуточном режиме со средними значениями модового объема и добротности, могут быть реализованы за счет гибридных плазмон-фотонных мод. Один из наиболее интересных способов добиться этого – помещение плазмонных наночастиц в регулярную решетку. За счет взаимодействия друг с другом посредством фотонов локализованные плазмонные резонансы гибридизуются и образуют спектр решеточных плазмонных резонансов. Такие резонансы уже имеют свою дисперсию, а главное обладают значительно большей добротностью, чем обычные плазмонные разонансы. Уникальные свойства таких систем позволяют использовать их в биосенсорах [1], направленных источниках света [2], перестраиваемых устройствах [3] и многих других целях [4].

В то же время численный расчет распространения света в подобных структурах затруднен. Такие универсальные методы как метод конечных элементов (FEM) или метод конечных разностей во временной области (FDTD) способны рассчитать любые периодические структуры, но при этом требуют очень много времени и вычислительных ресурсов. Расчет дисперсии с хорошим разрешением или оптимизация параметров структуры в таких условиях становятся крайне сложной задачей. Специализированный фурье-модальный метод (RCWA), предназначенный для описания периодических структур неспособен справиться с плазмонными решетками ввиду того, что необходимо учитывать много дифракционных порядков для описания локального высокоградиентного поля локализованных плазмонных резонансов. В этой работе мы предлагаем использовать для описания плазмонных решеток сочетание трех специализированных методов. Для нахождения тензора поляризуемости единичной изолированной частицы используется специализированный для ближнепольных расчетов метод конечных элементов (FEM). Для

согласования поляризации частиц в решетке и расчета эффективной поляризуемости частицы используется метод связанных диполей DDA. Для окончательного нахождения матрицы рассеяния плазмонной решетки и дальнейшего ее использования при рассмотрении слоистой структуры применяется фурье-модальный метод (RCWA). Использование каждого из методов по его прямому назначению делает расчеты наиболее быстрыми и точными, что позволяет рассчитывать зонные структуры слоистых периодических структур, которые включают плазмонные решетки, находящиеся внутри или на границе двух однородных сред. На рис. 1б–в показаны спектры экстинкции решетки золотых нанодисков, рассчитанные нашим методом. На спектрах хорошо видны дисперсии решеточных плазмонных резонансов различных поляризаций, а также аномалии Рэлея.

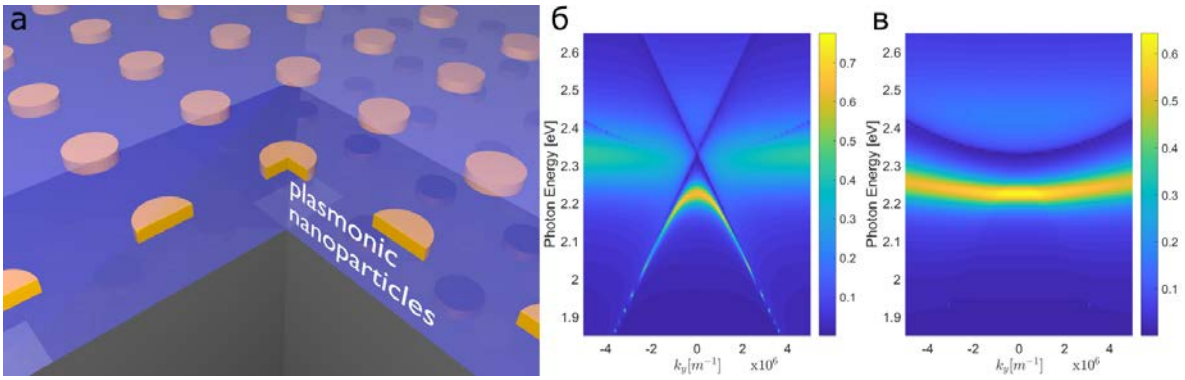


Рис. 1. (а) Решетка плазмонных частиц в однородном слое. (б–в) Спектр экстинкции (1-T) квадратной решетки с периодом 350 нм из золотых нанодисков диаметром 60 нм и высотой 30 нм в однородной среде с коэффициентом преломления 1.52. Плоскость падения проходит через ось трансляции решетки, на рисунке (б) изображен спектр *s*-поляризации, а на рисунке (в) *p*-поляризации.

Литература

1. *Shen Y., Zhou J., Liu T., Tao Y., Jiang R., Liu M., Xiao G., Zhu J., Zhou Z.-K., Wang X., Jin C., and Wang J.* Plasmonic gold mushroom arrays with refractive index sensing figures of merit approaching the theoretical limit // Nat. Commun. 2013. V. 4. P. 2381.
2. *Guo R., Derom S., Väkeväinen A.I., van Dijk-Moes R.J.A., Liljeroth P., Vanmaekelbergh D. and Törmä P.* Controlling quantum dot emission by plasmonic nanoarrays // Opt. Express. 2015. V. 23. P. 28206.
3. *Yang A., Hryn A.J., Bourgeois M.R., Lee W.-K., Hu J., Schatz G.C. and Odom T.W.* Programmable and reversible plasmon mode engineering // Proc. Natl. Acad. Sci. 2016. V. 113. P. 14201.
4. *Rajeeva B., Lin L. and Zheng Y.* Design and applications of lattice plasmon resonances // Nano Res. 2018. V. 11. P. 4423.

УДК 535.8

Исследование митохондрий методом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния

***С.М. Новиков*[1], *Н.А. Браже*[2], *Э.И. Никельшпарг*[2], *А.А. Семенова*[2], *Е.А. Гудилин*[2], *Ж.В. Бочкова*[2], *Л.И. Деев*[2], *А.А. Байжуманов*[2], *Г.В. Максимов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Биохимические процессы, происходящие в клетках/органеллах на ранних стадиях возникновения патологий, не поддаются диагностике современными методами из-за низких концентраций «участвующих» молекул или незначительных конформационных изменений в белках, появляющихся при развитии патологий. Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) идеальный инструмент для работы с молекулами при низких концентрациях [1, 2], позволяющий отследить появление конформационных изменений, вызванных патологией. За счет определенной геометрии поверхности плазмонных наноструктур и ее наноструктурирования (нанесения наночастиц на ее поверхность) возможно получить значительное усиление ближнего поля. Используя различную форму, размер, материал наночастиц, а также плотность нанесения и

распределение (периодическое или случайное) можно контролировать положение резонансов и величину усиления [3].

Селективное и чувствительное исследование компонентов электронной транспортной цепи (ЭТС) в функциональных митохондриях имеет важное значение для фундаментальных биофизических исследований и разработки новых методов медицинской диагностики. В настоящее время флуоресцентная микроскопия, абсорбционная спектроскопия и регистрация потребления O_2 обеспечивают только косвенную информацию об окислительно-восстановительном состоянии комплексов ЭТС в митохондриях. Мы предлагаем новый безмаркерный метод, основанный на спектроскопии ГКР для мониторинга конформационных изменений и окислительно-восстановительного состояния цитохрома *c* в ЭТС функциональных митохондрий [4]. Было продемонстрировано, что различные иерархические серебряные наноструктуры обеспечивают высокоинтенсивное усиление комбинационного рассеяния цитохрома *c* в митохондриях, не влияя на их морфологию и дыхание [5]. Зарегистрированные спектры SERS показывают набор характерных пиков при 750, 1127, 1170, 1371, 1565, 1585 и 1638 $см^{-1}$, что является следствием нормальных групповых колебаний пиррольных колец, монокристаллов и боковых радикалов в молекулах гемма. Было показано, что спектры ГКР цитохрома *c* в митохондриях чувствительны к активности транспорта электронов, скорости синтеза АТФ, потенциала митохондриальной мембраны, морфологии митохондрий и активности комплексов ЭТС. Было показано, что при использовании лазерного возбуждения с различной длиной волны можно выполнять высокочувствительный и селективный: (1) мониторинг окислительно-восстановительных переходов в цитохроме *c* (λ = 488 нм); (2) исследование изменений конформации и подвижности в цитохроме *c* (λ = 514 и 532 нм) и (3) исследование окислительно-восстановительных и конформационных свойств цитохромов a/a3 (λ = 632.8 нм лазерное возбуждение). Впервые было продемонстрировано, что спектры ГКР цитохрома *c* в функциональных митохондриях сердца различаются у здоровых и спонтанно гипертензивных крыс. Это открывает новые возможности для разработки диагностических инструментов на базе ГКР для прогнозирования развития сердечно-сосудистых заболеваний.

Данная работа поддержана грантом Российского научного фонда №18-19-00684.

Литература

1. *Beermann J.* [*et al.*]. Surface-enhanced Raman imaging of fractal shaped periodic metal nanostructures // J. Opt. Soc. Am. B. 2009. 26. 2370.
2. *Etchegoin P.G.* [*et al.*]. Resolving single molecules in surface-enhanced Raman scattering within the inhomogeneous broadening of Raman peaks // Ann. Chem. 2010. 82. 2888–92.
3. *Maier, S. A.* [*et al.*]. Plasmonics - a Route to Nanoscale Optical Devices // Adv. Mater. 2001. 13. 1501−1505.
4. *Brazhe N.A* [*et al.*]. Probing cytochrome c in living mitochondria with surface-enhanced Raman spectroscopy // Scientific Reports. 2015. 5. 13793. | DOI: 10.1038/srep13793.
5. *Sarycheva A.S, Brazhe N.A.* [*et al.*]. New nanocomposites for SERS studies of living cells and mitochondria // J. Mater. Chem. B. 2016. 4. 539–546. | DOI: 10.1039/c5tb01886b.

УДК 535

Когерентность металл-полупроводниковых нанолазеров

А.А. Вишневый, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Достигнутый прогресс в области фабрикации наноструктур десятилетие назад привел к появлению нового типа источников когерентного излучения – нанолазеров, обладающих физическими и модовыми размерами, сопоставимыми с их рабочей длиной волны. Из-за малых размеров резонатора частоты его соседних собственных мод заметно отличаются, что приводит к тому, что основная доля спонтанного излучения (> 0.1) из активной области приходится на основную лазерную моду. Характеристики нанолазеров заметно отличаются от таковых у макроскопических структур, в частности, на выходной характеристике порог не является резким, а иногда и вовсе отсутствует [1] (беспороговая лазерная генерация); темп спонтанной эмиссии из усиливающей среды сильно модифицирован по сравнению с однородной объемной средой (эффект

Парселла). Эти особенности ставят проблему: какие положения теории лазеров также верны для нанолазеров, а также как определить положение порога в «беспороговых» нанолазерах.

В данной работе мы изучаем когерентность второго рода излучения металл-полупроводниковых нанолазеров и показываем, что в нанолазерах при больших токах накачки достигается когерентное состояние, как и макролазерах. Однако, в отличие от последних, переход к когерентному состоянию происходит не в окрестности порога выходной характеристики, а при значительной большей силе тока или мощности накачки.

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

Литература

1. *M. Khajavikhan* [*et al.*]. Thresholdless nanoscale coaxial lasers // Nature. 2012. 482. 204–207.

УДК 533.922

Эффект суперинжекции в широкозонных полупроводниках

И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время широкозонные полупроводники находят свое применение в совершенно новых областях, таких как, например, однофотонные источники на основе центров окраски, работающие при электрической накачке [1, 2]. Для такого класса устройств крайне необходимо создать высокую концентрацию носителей заряда вблизи центра окраски, ведь от этого зависит скорость генерации фотонов при электрической накачке [3]. Однако в широкозонных полупроводниках часто возникают проблемы с созданием высокой концентрации свободных электронов или дырок из-за их высокой энергии активации и сильных эффектов компенсации основных примесей. Данный факт ограничивает максимальную скорость генерации фотонов при электрической накачке, что останавливает развитие электрически накачиваемых однофотонных источников на основе центров окраски в широкозонных полупроводниках.

В этой работе мы демонстрируем эффект суперинжекции в гомоструктурах на основе широкозонных полупроводников, про который ранее было известно, что он существует лишь в полупроводниковых гетероструктурах. Данный эффект позволяет инжектировать на порядки больше «проблемных» носителей, чем их число при равновесии. Это приводит к значительному увеличению скорости генерации фотонов центром окраски.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9 и Министерства образования и науки Российской Федерации (8.9898.2017/6.7).

Литература

1. *Choi S., Berhane A.M., Gentle A., Ton-That C., Phillips M.R. and Aharonovich I.* Electroluminescence from localized defects in zinc oxide: toward electrically driven single photon sources at room temperature // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2015. **7**. 5619–5623.
2. *Lohrmann A., Iwamoto N., Bodrog Z., Castelletto S., Ohshima T., Karle T.J., Gali A., Prawer S., McCallum J.C. and Johnson B.C.* Single-photon emitting diode in silicon carbide // Nat. Commun. 2015. 6. 7783.
3. *Fedyanin D.Y. and Agio M.* Ultrabright single-photon source on diamond with electrical pumping at room and high temperatures // New J. Phys. 2016. 18. 073012.

УДК 53

Управление зарядовым состоянием дефектов в алмазе и карбиде кремния

И.А. Храмцов, Д.Ю. Федянин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Многие центры окраски в широкозонных полупроводниках обладают электронным спином, который можно использовать в квантовой метрологии или квантовых вычислениях [1]. Однако

спиновые свойства точечного дефекта, коим является центр окраски, сильно зависят от его зарядового состояния. Поэтому необходимо управлять зарядом дефекта. Наиболее перспективным способом контроля зарядовых состояний центра окраски является его интеграция в электронное устройство, где с помощью электрического поля можно было бы управлять квазиуровнями Ферми как для электронов, так и для дырок и переключать или стабилизировать необходимое состояние. К настоящему моменту такой способ был экспериментально продемонстрирован на азотно-вакансионном комплексе в алмазе [2]. Однако реализация электрического контроля зарядового состояния дефектов в карбиде кремния, который, так же как и алмаз, содержит множество центров окраски с уникальными оптическими и магнитными свойствами, до сих пор не была показана.

В этой работе мы показываем, что возможно управление зарядового состояния дефектов в карбиде кремния.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-2602.2017.9 и Министерства образования и науки Российской Федерации (8.9898.2017/6.7).

Литература

1. *Atatüre M., Englund D., Vamivakas N., Lee S.-Y. and Wrachtrup J.* Material platforms for spin-based photonic quantum technologies // Nature Reviews Materials. 2018. 3. 38–51.
2. *Doi Y., Makino T., Kato H., Takeuchi D., Ogura M., Okushi H., Morishita H., Tashima T., Miwa S., Yamasaki S., Neumann P., Wrachtrup J., Suzuki Y. and Mizuochi N.* Deterministic Electrical Charge-State Initialization of Single Nitrogen-Vacancy Center in Diamond // Phys. Rev. X. 2014. 4.

УДК 535-46

Спектральная эллипсометрия двумерного MoS_2 – анализ экситонных эффектов

Г.А. Ермолаев[1,2]***, Д.И. Якубовский***[1]***, Ю.В. Стебунов***[1]***, А.В. Арсенин***[1]***, В.С. Волков***[1,3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Университет Южной Дании

Двумерные дихалькогениды переходных металлов (MoS_2, $MoSe_2$, WS_2, WSe_2 и другие) вызывают большой интерес среди исследователей благодаря их необычным физическим свойствам и многообещающим приложениям в нанофотонике и оптоэлектронике (ван-дер-ваальсовы гетероструктуры, полевые транзисторы, фотодетекторы и электролюминесцентные устройства) [1]. При этом оптические свойства одних и тех же двумерных материалов могут сильно различаться, например, в зависимости от способа получения (механическое разделение или химическое осаждение из газовой фазы) и материала подложки (графен, h-BN, металл или диэлектрик) [1].

В рамках настоящей работы для определения оптических констант использован метод спектральной эллипсометрии, который позволяет получать точные (вплоть до 0,1%) значения диэлектрических констант. К настоящему времени опубликовано около трех десятков работ, посвященных эллипсометрии двумерных дихалькогенидов переходных металлов и в особенности MoS_2 [2, 3]. Предложенные в этих работах подходы требуют большого числа дисперсионных параметров среды, например, как в случае работы [3], где количество модельных параметров для описания эллипсометрического спектра (в диапазоне энергий от 1,2 до 6 эВ) равняется 26. Использование такого большого числа модельных параметров может привести к физически неправильному результату. В докладе предложена физическая модель и алгоритм для анализа эллипсометрического спектра отражения для монослоя MoS_2, выращенного на подложке SiO_2/Si методом химического осаждения из газовой фазы. Исследования выполнены с помощью спектрального эллипсометра Woollam VASE в диапазоне длин волн от 366 до 3300 нм с шагом 2 и 5 нм и широком интервале углов от 30° до 70°. При анализе спектров учитывалось, что значительный вклад в оптический отклик дают экситонные эффекты [2], а в рассматриваемом интервале длин волн это так называемые A, B и C-экситоны (зонная структура MoS_2 представлена

на рис. 1 [4]). Данные экситоны связаны с различными межзонными переходами, поэтому их можно описать независимо дисперсионной функцией осциллятора Таук–Лоренца (1):

$$\begin{cases} \varepsilon_2 = \dfrac{A \cdot E_o \cdot C \cdot \left(E - E_g\right)^2}{\left(E^2 - E_0^2\right)^2 + C^2 \cdot E^2} \cdot \dfrac{1}{E}, E > E_g, \\ \varepsilon_2 = 0, E > E_g, \\ \varepsilon_1 = \dfrac{2}{\pi} \cdot P \int_{E_g}^{\infty} \dfrac{x \cdot \varepsilon_2(x)}{x^2 - E^2} dx. \end{cases} \quad (1)$$

В данном представлении диэлектрическая функция MoS_2 является суммой трех функций. В данном случае для описания спектра требуется всего 10 параметров, причем каждый из них имеет физический смысл, например, E_0 – положение критической точки зонной структуры MoS_2. Результаты анализа спектров эллипсометрии представлены на рис. 2, где для подтверждения полученных результатов приведены значения диэлектрических констант точного решения обратной задачи эллипсометрии, то есть когда каждая точка спектра рассматривается как независимая. На рис. 2б представлены результаты анализа спектров, полученные с малым шагом снятия спектра – 5 нм. Видно, что даже при уменьшении количества данных результат получается удовлетворительным, но с небольшой потерей точности. Стоит отметить, что предлагаемый подход универсален и может быть использован для исследования других двумерных дихалькогенидов переходных металлов, так как их оптические свойства также преимущественно определяются экситонными эффектами.

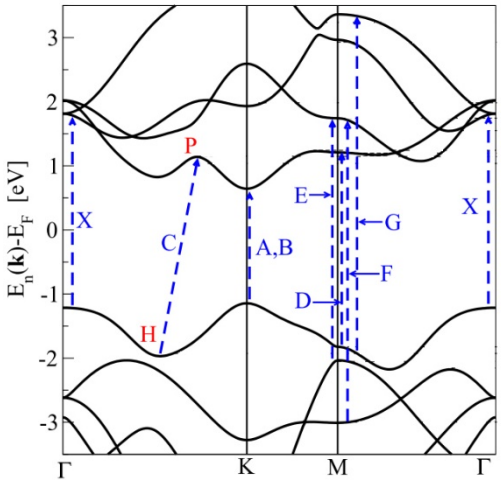


Рис. 1. Зонная структура двумерного MoS_2 [4]

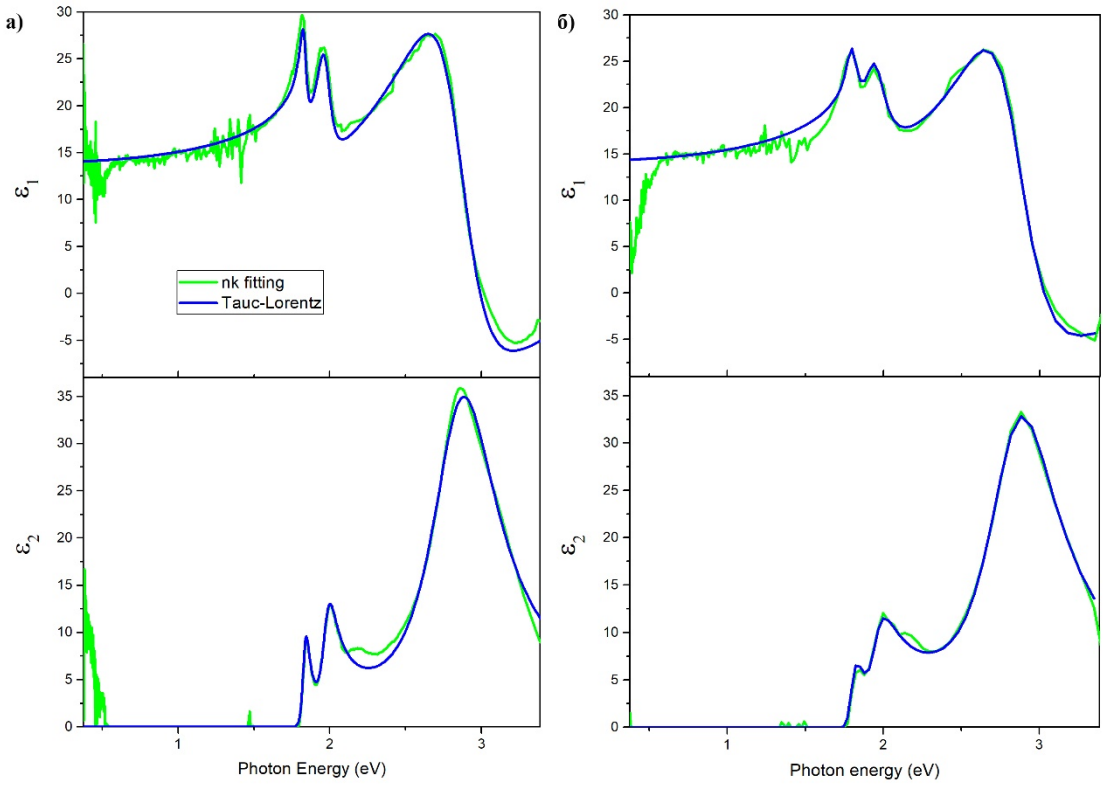


Рис. 2. Диэлектрическая проницаемость двумерного MoS2, полученная с помощью спектральной эллипсометрии с шагом 2 нм (а) и 5 нм (б). Моделирование суммой функций Таук–Лоренца представлено синим цветом, а точное решение обратной задачи эллипсометрии представлено зеленым цветом

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-20061 мол_а_вед.

Литература

1. *Wang Q.H., Kalantar-Zadeh K., Kis A., Coleman J.N., and Strano M.S.* Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides // Nature Nanotechnology. 20012. *7*(11). 699–712. https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193
2. *Yu Y., Yu Y., Cai Y., Li W., Gurarslan A., Peelaers H., Cao L.* [*et al.*] Exciton-dominated Dielectric Function of Atomically Thin MoS2 Films. // Scientific Reports. 2015. 5(1). 16996. https://doi.org/10.1038/srep16996
3. *Liu H.L., Shen C.C., Su S.H., Hsu C.L., Li M.Y. and Li L.J.* Optical properties of monolayer transition metal dichalcogenides probed by spectroscopic ellipsometry. // Applied Physics Letters. 2014. 105(20). https://doi.org/10.1063/1.4901836
4. *Despoja V., Rukelj Z. and Marušić L.* Ab initio study of electronic excitations and the dielectric function in molybdenum disulfide monolayer. // Physical Review B. 2016. 94(16), 1–10. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.165446

УДК 535.016

Высокочувствительные оптические биосенсоры на основе металл-диэлектрических интерфейсов и адсорбционных поверхностей из двумерных материалов

***Ю.В. Стебунов*[1], *Д.И. Якубовский*[1], *А.В. Арсенин*[1], *В.С. Волков*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Университет Южной Дании

Использование двумерных материалов при создании биосенсорных интерфейсов позволяет повысить их чувствительность и надежность, а также делает их производство более технологичным. В предлагаемом докладе будут рассмотрены оптические безмаркерные биосенсоры на основе

поверхностного плазмонного резонанса (ППР), использующие адсорбционные матрицы на основе двумерных материалов [1]. В настоящее время существуют сотни двумерных материалов, имеющих большую площадь поверхность и уникальные оптические и биохимические свойства. Однако лишь несколько из них использовались в качестве функциональных элементов биосенсоров, а подавляющее число научных работ посвящено биосенсорам на основе графена и его химических производных. В данной работе были исследованы биосенсорные чипы со связующими слоями из графена и оксида графена (ОГ) [2, 3]. Эффективность их работы была проверена с использованием коммерческих спектрометров на основе ППР (BiOptix Accolade 104SA и Biacore T200); было получено, что использование связующих слоев из ОГ позволяет достичь 30-кратного прироста чувствительности по сравнению с коммерческими аналогами на основе связующих слоев из водорастворимых полимеров. Были изучены различные способы иммобилизации биомолекул на поверхности графена и ОГ и способы регенерации поверхностей. Кроме того, была исследована эффективность использования биосенсорных чипов на основе интерфейсов, включающих тонкие медные пленки, покрытые защитными слоями из разных диэлектриков. В результате были получены оптимальные конфигурации биосенсорных чипов, которым соответствует максимальное значение чувствительности. Иммобилизация биомолекул на поверхности медно-диэлектрических биосенсорных чипов осуществлялась с использованием адсорбционных матриц из ОГ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-00302 мол_а и стипендии Президента РФ (СП-4754.2018.5).

Литература

1. *Stebunov, Y.V., Arsenin, A.V., Volkov V.S.* Functionalization of chemically derived graphene for surface plasmon resonance (SPR) biosensors. // Chemically Derived Graphene: Functionalization, Properties and Applications. UK: The Royal Society of Chemistry. 2018. Ch. 12. P. 328–353.
2. *Stebunov Y.V., Aftenieva O.A., Arsenin A.V., Volkov V.S.* Highly Sensitive and Selective Sensor Chips with Graphene-Oxide Linking Layer // ACS Applied Materials & Interfaces. V. 7(39). P. 21727–21734.
3. *Stebunov Yu.V., Yakubovsky D.I., Fedyanin D.Yu., Arsenin A.V., Volkov V.S.* Superior sensitivity of copper-based plasmonic biosensors // Langmuir. 2018. V. 34(15). P. 4681-4687.

УДК 538.9

Теоретическое исследование безызлучательной рекомбинации и оптического усиления в квантовых ямах из теллурида кадмия-ртути

Г.В. Алымов, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для задач инфркрасной и терагерцовой спектроскопии требуются эффективные, компактные и дешёвые источники среднего/дальнего инфракрасного излучения, способные работать при комнатной температуре. Основными узкополосными источниками электромагнитного излучения в этих диапазонах на данный момент являются квантово-каскадные и межзонные каскадные лазеры, которые требуют высокоточного выращивания многослойных гетероструктур и обладают высокой стоимостью. В последнее время ведутся экспериментальные исследования по возможности генерации ИК- и ТГц-излучения в одиночных квантовых ямах на основе твёрдых растворов теллурида кадмия-ртути (КРТ) [1]. В данных ямах можно варьировать ширину запрещённой зоны в пределах 0–1.6 эВ за счёт выбора толщины и состава ямы, поэтому инжекционные лазеры на основе таких ям потенциально могут покрыть широкий спектральный диапазон и стать более дешёвой альтернативой каскадным лазерам.

В настоящей работе исследуются процессы безызлучательной рекомбинации и оптического усиления в квантовых ямах $Cd_xHg_{1-x}Te/Cd_yHg_{1-y}Te/Cd_xHg_{1-x}Te$. В расчётах использованы законы дисперсии и волновые функции, рассчитанные в восьмизонной модели Кейна с параметрами гамильтониана, найденными из экспериментальных данных [2].

Закон дисперсии в таких квантовых ямах зависит от толщины ямы d, при этом ширина запрещённой зоны меняется немонотонно, обращаясь в ноль при некоторой критической толщине

ямы (около 6 нм для ямы $Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te/HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$). При этом зоны являются существенно непараболическими: зона проводимости по форме близка к гиперболе с линейной асимптотикой при больших импульсах, а валентная зона имеет кольцеобразный боковой максимум, который в широких ямах поднимается выше центрального, и яма становится непрямозонной.

Как показывается в настоящей работе, эффекты непараболичности зон играют существенную роль в процессах оже-рекомбинации в рассматриваемых ямах. Так, при толщинах, близких к критической (то есть для наиболее узкозонных ям), закон дисперсии при малых импульсах имеет дираковский (гиперболический) вид. При дираковском законе дисперсии оже-рекомбинация оказывается запрещена законами сохранения, разрешены лишь многочастичные процессы более высокого порядка по кулоновскому взаимодействию [3]. В КРТ-ямах из-за отклонения спектра от дираковского оже-рекомбинация оказывается разрешена, но лишь для носителей с большими энергиями, при которых валентная зона начинает отклоняться от гиперболической формы. Это приводит к подавлению оже-рекомбинации в таких ямах по сравнению со случаем параболических зон (см. область вблизи d = 6 нм на рис. 1), когда оже-рекомбинация возможна уже при более низких энергиях.

В широких ямах боковой максимум валентной зоны поднимается выше центрального, и яма становится непрямозонной. При этом становится возможным CHHH-процесс с участием двух дырок из бокового максимума и электрона со дна зоны проводимости, из-за чего исчезает энергетический порог для оже-рекомбинации (рис. 1, d > 7 нм) и её темп существенно возрастает.

Также были проведены расчёты оптической проводимости в рассматриваемых ямах. Были определены пороговые концентрации неравновесных носителей, при которых среда становится усиливающей. Для этих концентраций были рассчитаны времена безызлучательной рекомбинации, которые составили от единиц пс для ям с толщиной, близкой к критической (6 нм) до единиц нс для более широкозонных ям (d = 2 нм) при комнатной температуре.

Полученные времена были затем использованы для оценки пороговых токов инжекционных лазеров на основе КРТ-ям (рис. 2). Пороговые токи остаются в районе единиц кА/см^2 при комнатной температуре (типичная величина для квантово-каскадных лазеров) даже в достаточно длинноволновой области, лишь в терагерцовой области поднимаясь до десятков кА/см^2, что свидетельствует о перспективности КРТ-ям для создания дешёвых инфракрасных лазеров в широком диапазоне длин волн.

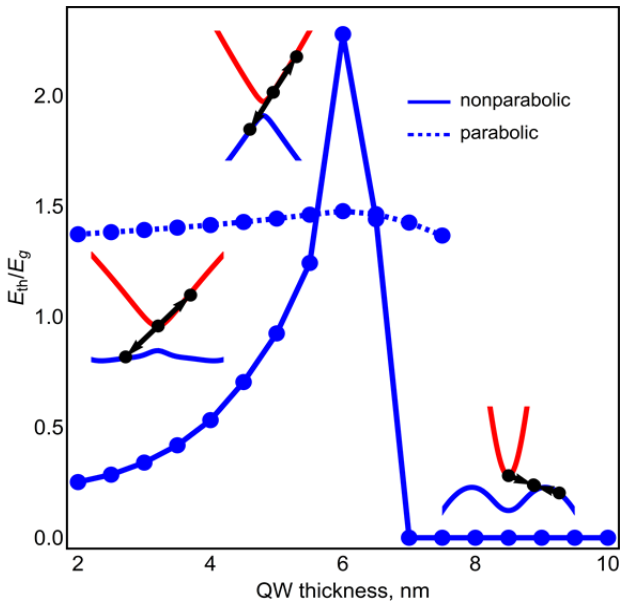


Рис. 1. Зависимость энергетического порога оже-рекомбинации, нормированного на запрещённую зону, от толщины квантовой ямы $Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te/HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$. Сплошная линия: пороги, рассчитанные с использованием точных законов дисперсии в восьмизонной модели Кейна. Пунктирная линия: пороги, рассчитанные в приближении параболических зон (обрыв на толщине 7.5 нм связан с уходом эффективной массы дырок в отрицательную область). Также изображены законы дисперсии и пороговые оже-процессы для ям разных толщин

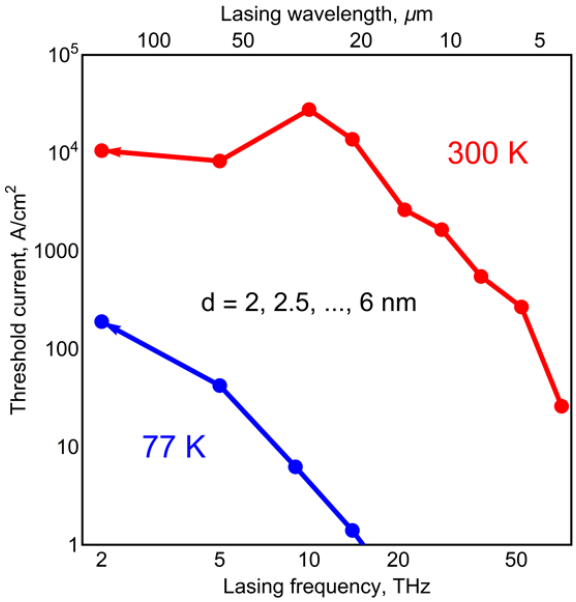


Рис. 2. Зависимость порогового тока лазерной генерации в квантовых ямах $Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te/HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$ от частоты/длины волны генерации при комнатной температуре (верхняя кривая) и температуре жидкого азота (нижняя кривая). Точки соответствуют ямам толщиной от 2 до 6 нм с шагом 0.5 нм (справа налево)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-37-60110\16.

Литература

1. *Ruffenach S.* [*et al.*] HgCdTe-based heterostructures for terahertz photonics // APL Materials. 2017. V. 5, N 3. P. 35503.
2. *Zholudev M.* [*et al.*] Magnetospectroscopy of two-dimensional HgTe-based topological insulators around the critical thickness // Physical Review B. 2012. V. 86, N 20. P. 205420.
3. *Alymov G., Svintsov D., Vyurkov V., Ryzhii V., Satou A.* Auger recombination in Dirac materials: a tangle of many-body effects // Physical Review B. 2018. V. 97. P. 205411.

УДК 538.935

Теория возмущений для гидродинамических плазменных эффектов в двумерных электронных системах

А.С. Петров, Д.А. Свинцов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Гидродинамическая модель движения электронов в твёрдом теле была впервые предложена Блохом в 1933 году [1] как упрощенный язык описания плазменных явлений. Несмотря на простоту теории, экспериментальное наблюдение гидродинамических явлений весьма затруднительно: частое рассеяние носителей на примесях и фононах в твёрдом теле, как правило, препятствует их коллективному поведению. Появление сверхчистых образцов графена с высокоэнергетичным спектром фононов позволило преодолеть эти проблемы, и в 2016 году гидродинамический транспорт электронов была реализован [2, 3].

Таким образом, на данный момент электронная гидродинамика переживает второе рождение. Это влечёт за собой потребность в пересмотре соответствующей теоретической базы, и данное исследование направлено на изучение высокочастотных свойств двумерной электронной жидкости. А именно нас будет интересовать отклик произвольной двумерной электронной системы (ДЭС) на внешнее возмущение: приложение электрического и/или магнитного полей, рассеяние носителей на примесях, эффекты электронной вязкости и пр.

Для проведения такого анализа мы используем операторный подход к уравнениям гидродинамики заряженной жидкости [1], который позволяет построить аналог квантово-

механической теории возмущений и получить выражение для поправок к собственной частоте колебаний плазменных мод в ДЭС.

Данный результат служит отличной платформой для исследования разнообразных эффектов в ДЭС. В качестве наглядной иллюстрации мы применяем построенную теорию для анализа устойчивости плазменных мод в ДЭС, что является актуальной задачей в контексте генерации терагерцового излучения [4]. Так, нам удалось установить чёткую связь между асимметрией транзисторов на основе ДЭС и развитием плазменной неустойчивости в них. При этом большая роль отводится приконтактным явлениям, которые, видимо, и ответственны за возникновение неустойчивостей – в том числе и в многозатворных (периодических) структурах. Также наша теория позволяет выявить общие свойства краевых плазмонных мод [5]: темп роста волн с противоположными волновыми векторами одинаков. Приложения предлагаемой теории весьма широки и не ограничивается рассмотренными примерами.

Исследование поддержано грантами РФФИ 18-37-00206 и РНФ 16-19-10557.

Литература

1. *Bloch Felix.* Bremsvermögen von Atomen mit mehreren Elektronen // Zeitschrift f˙ur Physik A Hadrons and Nuclei. 1933. V 81. 363.
2. *Bandurin Denis* [*et.al.*]. Negative local resistance caused by viscous electron backflow in graphene // Science. V. 351. 1055–1058.
3. *Crossno Jesse* [*et.al.*]. Observation of the Dirac fluid and the breakdown of the Wiedemann-Franz law in graphene // Science. V. 351. 1058–1061.
4. *Dyakonov Michael, Shur Michael.* Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71. 2465.
5. *Volkov Vladimir, Mikhailov Sergey.* Edge magnetoplasmons: low frequency weakly damped excitations in inhomogeneous two-dimensional electron systems // Zh. Exp. Teor. Fiz. 1988. V. 94. 217–241.

УДК 535-14

Диэлектрический отклик монокристаллических гексаферритов M-типа $Ba_{1-x}Pb_xFe_{12}O_{19}$ в терагерцовом-инфракрасном диапазоне частот

***А.В. Чечёткин*[1] *Л.Н. Алябьева*[1], *В.И. Торгашев*[2], *Д.А. Винник*[3], *С.А. Гудкова*[1,3], *А.С. Прохоров*[1,4], *М. Дрессель*[1,5], *Б.П. Горшунов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Южный Федеральный Университет
[3]Южно-Уральский государственный университет
[4]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[5]Physikalisches Institut, Universitat Stuttgart

В гексаферритах M-типа, $AM_{12}O_{19}$, в роли крупного катиона A выступают ионы Ba, Pb, Sr, а более мелкие катионы наиболее часто представлены ионами Fe. Благодаря своим магнитным свойствам (высокая намагниченность насыщения, большая коэрцитивная сила и т. д.) гексаферриты M-типа крайне востребованы в различных областях электроники, связанных с генерацией, детектированием и фильтрацией сигналов, широко представлены в устройствах телекоммуникаций. Подстройка функциональных параметров в данных соединениях осуществима благодаря достаточно сложному строению кристаллической решетки, в которой крупный катион (Ba, Pb и т. д.) имеет двенадцатикоординационное окружение, а ионы Fe^{3+} распределяются по пяти различным кристаллографическим позициям, три из которых октаэдрические, одна тетраэдрическая и одна представляет собой тригональную бипирамиду. Частичная замена ионов бария на более тяжелые ионы свинца приводит к разупорядочению структуры, изменению локальной симметрии сайт-позиций катионов и, как следствие, влияет на диэлектрические характеристики соединения (комплексную диэлектрическую проницаемость, комплексный показатель преломления, тангенс угла потерь и т. д.) [1].

В данной работе методами терагерцовой и инфракрасной спектроскопии изучены спектры комплексной диэлектрической проницаемости монокристаллов гексаферрита бария-свинца $Ba_{0.4}Pb_{0.6}Fe_{12}O_{19}$, $Ba_{0.2}Pb_{0.8}Fe_{12}O_{19}$ и $Ba_{0.9}Pb_{0.1}Fe_{12}O_{19}$ в области частот 10–8000 $см^{-1}$ в диапазоне

температур 10–300 K при поляризации вектора электрического поля зондирующего излучения *E* перпендикулярно кристаллографической оси *c*. В области 10–100 см$^{-1}$ с применением терагерцового импульсного спектрометра TPS Spectra 3000 были получены спектры пропускания, а в диапазоне частот от 50 до 8000 см$^{-1}$ при помощи инфракрасного вакуумного фурье-спектрометра Vertex 80v были зарегистрированы спектры отражения приготовленных образцов. Далее было проведено моделирование наблюдаемых особенностей методом наименьших квадратов с использованием модели независимых лорентцианов, что позволило определить параметры (диэлектрический вклад, резонансная частота, затухание, сила осциллятора) зарегистрированных резонансных линий поглощения.

Природа наблюдаемых в области частот 90–1000 см$^{-1}$ резонансных линий поглощения связывается с решеточными возбуждениями [2]. На более низких частотах, 10–90 см$^{-1}$, обнаружена серия резонансных возбуждений (рис. 1), природа которых связывается с электронными переходами в тонкой структуре основного состояния Fe^{2+}, расщепленного под действием спин-орбитального взаимодействия второго порядка.

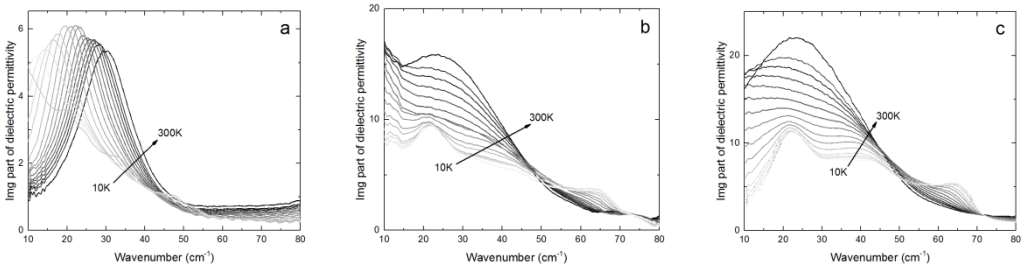


Рис. 1. Температурная динамика мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости монокристаллов $Ba_{0.1}Pb_{0.9}Fe_{12}O_{19}$ (a), $Ba_{0.4}Pb_{0.6}Fe_{12}O_{19}$ (b) и $Ba_{0.2}Pb_{0.8}Fe_{12}O_{19}$ (c) в диапазоне температур от 300 до 10 K

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-32-70012 и программы 5топ100.

Литература

1. *Obradors, X., Collomb, A., Pernet, M., Samaras, D., & Joubert, J.C.* X-ray analysis of the structural and dynamic properties of BaFe 12 O 19 hexagonal ferrite at room temperature // Journal of Solid State Chemistry. 1985. 56(2). 171–181.
2. *Zhukova E.S., Mikheykin A.S., Torgashev V.I., Bush A.A., Yuzyuk Yu.I., Sashin A.E., Prokhorov A.S., Dressel M., Gorshunov B.P.* Crucial influence of crystal site disorder on dynamical spectral response in artificial magnetoplumbites. Solid State Sciences. 2016. 26. 13–21.

УДК 535.343.9

Спектроскопия плазмонного резонанса в графене

***Е.И. Титова*[1,2], *А.Н. Былинкин*[1], *М.А. Кащенко*[1], *В.В. Михеев*[1], *Е.С. Жукова*[1], *В.Е. Кайдашев*[1], *Д.А. Свинцов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]НИИ молекулярной электроники

Эффект поверхностного плазмонного резонанса состоит в возбуждении поверхностных плазмонов на их резонансной частоте внешним излучением. Поверхностные плазмоны обладают более высокой локализацией электромагнитного поля по сравнению с фотонами, благодаря чему играют важную роль в современной оптоэлектронике. Графеновые плазмоны, в свою очередь, обладают уникальной возможностью контроля частоты плазмонного резонанса за счет изменения напряжения на затворе. Но для возбуждения плазмонных мод требуется преодолеть рассогласование волнового вектора падающей электромагнитной волны и плазмона. Нарезание графена на массив микролент [1] или использование периодических диэлектрических решеток [2]

позволяет возбуждать классические графеновые плазмоны с корневой зависимостью частоты от волнового вектора, который определяется периодом массива микролент или диэлектрической решетки. Один из альтернативных способов возбуждения плазмонов – использование субволновой металлической решетки, расположенной вблизи графена. Близкое расположение металлической решетки к графену приводит к возбуждению сильно связанных с металлом плазмонов. Структуры с металлическими решетками хорошо изучены теоретически [3], однако до сих пор не были экспериментально изучены плазмонные резонансы в данных структурах в ТГц диапазоне.

В данной работе были исследованы транзисторные структуры с монослоем графена в качестве канала и металлической решеткой из титана, отделённой от графена тонким диэлектрическим слоем из hBN толщиной 14 нм (Рис.1a). Графен, выращенный методом химического осаждения из газовой фазы (ХОГФ) на меди, а также многослойный ХОГФ hBN толщиной 14 нм, переносились на подложку Si/SiO_2 с использованием стандартного метода жидкостного травления меди [4]. Значения подвижности графена в наших образцах оказались порядка 1000 $см^2В^{-1}сек^{-1}$. Золотые контакты к графену толщиной 60 нм были сделаны методом магнетронного напыления с подслоем хрома. Металлическая решетка выполнена методом электронной литографии с электронно-лучевым напылением титана.

Спектры поглощения в ТГц/среднем ИК-диапазоне длин волн изучались методами ТГц спектроскопии/ИК-фурье спектроскопии. Пренебрегая отражением/рассеянием величина поглощения образца относительно поглощения в точке нейтральности равна $A = 1 - \frac{T_{Vgate}}{T_{CNP}}$, где T_{CNP} – пропускание графена в точке электронейтральности. Спектры поглощения измерялись при различных напряжениях на затворе при поляризации падающего излучения параллельно и перпендикулярно металлической решётке. В случае параллельной поляризации решётка не может возбудить плазмон, и наблюдается только широкая полоса друде-поглощения на свободных носителях. Времена релаксации $\tau \approx 10^{-13}$сек, полученные из обработки спектров с применением модели Друде для разных образцов, хорошо коррелируют с измеренными из транзисторных характеристик значениями подвижностей носителей заряда в графене. В случае перпендикулярной поляризации в спектрах пропускания кроме поглощения на свободных носителях наблюдается вклад, вызванный возбуждением плазмонного резонанса в структуре. Для выделения чисто плазмонного вклада спектры пропускания при одной поляризации делились на другую.

В результате были измерены и исследованы плазмонные резонансы в графене (Рис.1b). Ожидалось, что значение резонансной частоты в графене будет соответствовать закону дисперсии с характерным волновым вектором $q = \frac{2\pi}{d}$ [5], где d – период решётки. Однако такая оценка дает значение частоты >10 ТГц, несовместимое с экспериментальными результатами. Тем не менее хорошее согласие с наблюдаемой резонансной частотой достигается, если оценивать дисперсию плазмонов с волновым вектором, зависящем от ширины одной металлической полоски L_g (рис. 2). Таким образом, мы показали, что частота плазмонного резонанса в периодически гейтированной структуре на основе графена, отделенного от решетки диэлектриком толщиной много меньше длины волны плазмона, зависит от фактора заполнения L_g, а не от периода решетки d, и, кроме того, волновой вектор в таком случае определяется как $q = \frac{\pi}{L_g}$.

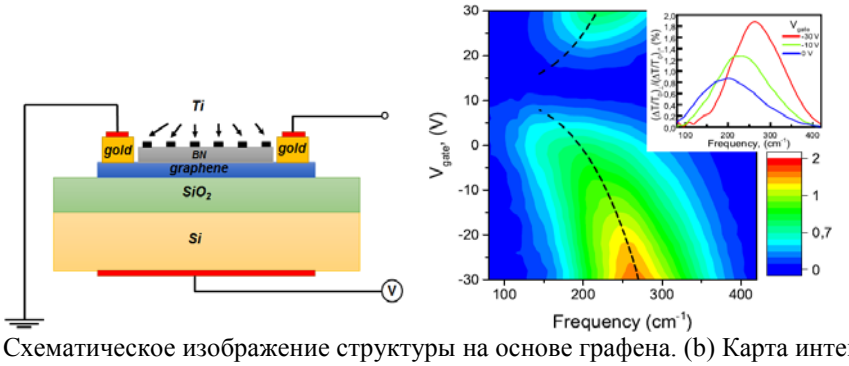


Рис. 1. (a) Схематическое изображение структуры на основе графена. (b) Карта интенсивности усиления спектров поглощения, соответствующих плазмонному вкладу, как функция частоты и напряжения на затворе. Пунктирные линии соответствуют теоретическому расчету закона дисперсии гейтированных

плазмонов. На вставке показано несколько разрезов карты интенсивности при определенных напряжениях на затворе

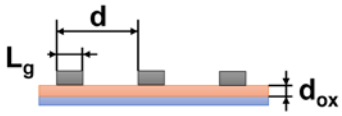


Рис. 2. Схематическое изображение металлической решетки, лежащей на структуре диэлектрик (оранжевый)/графен (синий), d – период решетки, L_g – ширина одной металлической полоски, d_{ox} – толщина слоя диэлектрика.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00986.

Литература

1. *Ju L.* [*et al.*]. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials // Nature Nanotechnology. 2011. V. 6. P. 630–634.
2. *Gao W.* [*et al.*]. Excitation and Active Control of Propagating Surface Plasmon Polaritons in Graphene// Nano Letters. 2013. V. 13. 3698−3702.
3. *Fateev D. V.* [*et al.*]. Terahertz plasmonic rectification in a spatially periodic graphene // Applied Physics Letters. 2017. V. 110. P. 061106.
4. *Li X.* [*et al.*]. Transfer of Large-Area Graphene Films for High-Performance Transparent Conductive Electrodes // Nano Letters. 2009. V. 9. N. 12. P. 4359–4363.
5. *Mikhailov S.A.* Plasma instability and amplification of electromagnetic waves in low-dimensional electron systems // Physical Review B. 1998. V. 58. N. 3. P. 1517–1532.

УДК 535.016

Оптические и электрические свойства тонких пленок меди и золота на различных подложках

Д.И. Якубовский, Р.В. Киртаев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе представлены результаты исследований оптических и электрических свойств тонких пленок меди и золота (20–200 нм) на различных подложках (графен и стекло). Ранее нами было продемонстрировано, что оптические и электрические свойства тонких металлических пленок зависят от толщины и определяются структурными параметрами пленки (размерами кристаллитов) [1]. Рассмотрение графена в качестве материала подложки для осаждения металловвызвано интересом к гибридным графен-металлическим наноструктурам в различных приложениях оптоэлектроники (например, солнечная энергетика, фотодетекторы и сенсоры) [2]. Свойства осаждаемых на графен материалов зависят в том числе и от числа слоев графена на подложке [3, 4]. Результаты наших исследований демонстрируют, что наличие монослоя графена на подложке SiO_2 приводит к изменению кинетики роста металлической пленки, что в значительной степени влияет на ее структурные, оптические и электрические свойства (рис. 1). Осаждение тонких пленок меди и золота осуществлялось посредством электронно-лучевого испарения металлов в высоком вакууме, а анализ их свойств выполнен с помощью сканирующей электронной микроскопии (структура поверхности пленок), атомно-силовой микроскопии (толщины пленок), рентгеновской дифрактометрии (размеры кристаллитов), четырех зондового метода (поверхностное сопротивление), и спектральной эллипсометрии и фотометрии (диэлектрическая проницаемость, спектры пропускания и отражения). Типовая методика измерений представлена в работах [5, 6]. Рисунок 1 демонстрирует различие в кинетике роста тонких пленок металлов на графене и поверхности стекла. Если на стекле при толщине 8 нм формируется однородная структура металла, то на графене мы наблюдаем совокупность металлических кластеров. Кроме того, спектры пропускания показывают, что на кинетику роста металла на графене значительное влияние оказывает температура (представлены данные для металлических пленок, выращенных при 20 и 170°C).

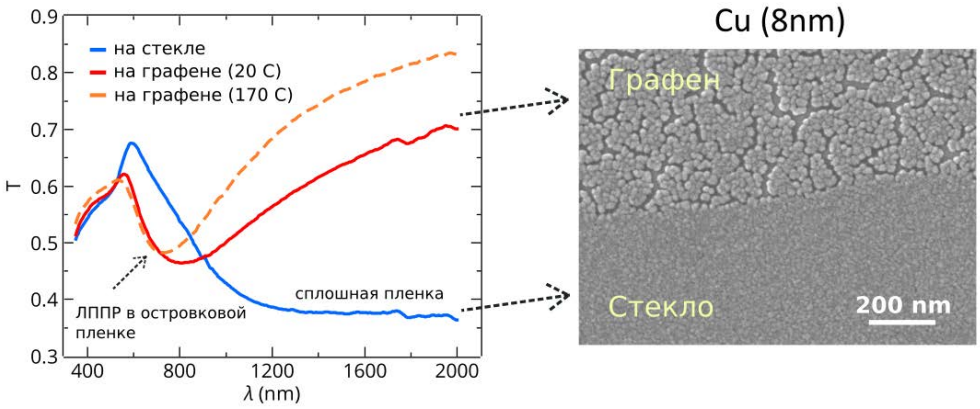


Рис. 1. Измеренный оптический коэффициент прохождения *T* тонкой медной пленки толщиной 8 нм на графене и поверхности стекла. Изображение, полученное с помощью сканирующей электронной микроскопии, медной пленки на границе графен-стекло

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-00308\18 мол_а.

Литература

1. *Yakubovsky D.I., Arsenin A.V., Stebunov Y.V., Fedyanin D.Y., Volkov V.S.* Optical constants and structural properties of thin gold films // Optics Express. 2017. V. 25. P. 25574.
2. *Li X., Zhu J., Wei B.* Hybrid nanostructures of metal/two-dimensional nanomaterials for plasmon-enhanced applications // Chem. Soc. Rev. 2016. V. 45. P. 3145.
3. *Ruffino F., Giannazzo F.*A review on metal nanoparticles nucleation and growth on/in graphene // Crystals. 2017. V. 7. P. 219.
4. *Zhou H., Qiu C., Liu Z., Yang H., Hu L., Liu J., Yang H., Gu G., Sun L.* Thickness-dependent morphologies of gold on N-layer graphenes // J. Am. Chem. Soc. 2009. V. 32. P. 944–946.
5. *Yakubovsky D.I., Stebunov Y.V., Kirtaev R.V., Voronin K.V., Voronov A.A., Arsenin A.V., Volkov V.S.* Graphene-supported thin metal films for nanophotonics and optoelectronics (submitted).
6. *Volkov V.S., Yakubovsky D.I., Stebunov Y.V., Kirtaev R.V., Voronin K.V., Arsenin A.V.* Hybrid graphene-nanometallic structures // Journal of Physics: Conference Series. 2018. V. 1092.

УДК 535.016

Структурные свойства тонких пленок золота и меди на поверхности графена

Р.В. Киртаев, Д.И. Якубовский

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Исследование графена и его структурных, химических и электрических свойств открыло возможности для создания наноструктур и функциональных устройств, использующих уникальные свойства этого двумерного материала. При анализе этих свойств графен необходимо рассматривать в совокупности с материалами, контактирующими с ним. В настоящем докладе мы обращаем внимание на гибридные структуры на основе графена и тонких металлических пленок плазмонных металлов (золота и меди), которые в последнее время находят широкое применение в разработке различных оптоэлектронных устройств [1]. Известно, что кинетика роста металлов на поверхности графена существенно отличается от кинетики роста на обычных подложках (SiO_2, Si) [2, 3], что может стать ограничением для получения сплошных тонких пленок некоторых металлов [3, 4]. Изучение кинетики роста тонких металлических пленок на графене и изучение их свойств представляется важным для разработки технологий создания гибридных графен-металлических многослойных структур.

В настоящей работе исследуется рост тонких медных и золотых пленок на графеновом подслое, а также их структурные и электрические свойства. Было показано, что пленки на графене, полученные физическим осаждением в высоком вакууме, демонстрируют различную морфологию, в зависимости от металла, толщины и параметров напыления. С использованием метода сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) обнаружено, что золото и медь показывают

различные пределы перколяции пленки и степень заполнения поверхности металлом, в зависимости от скорости осаждения металла. В работе проведено сравнение металлических пленок осажденных на графен и подложу SiO_2 (рис. 1).

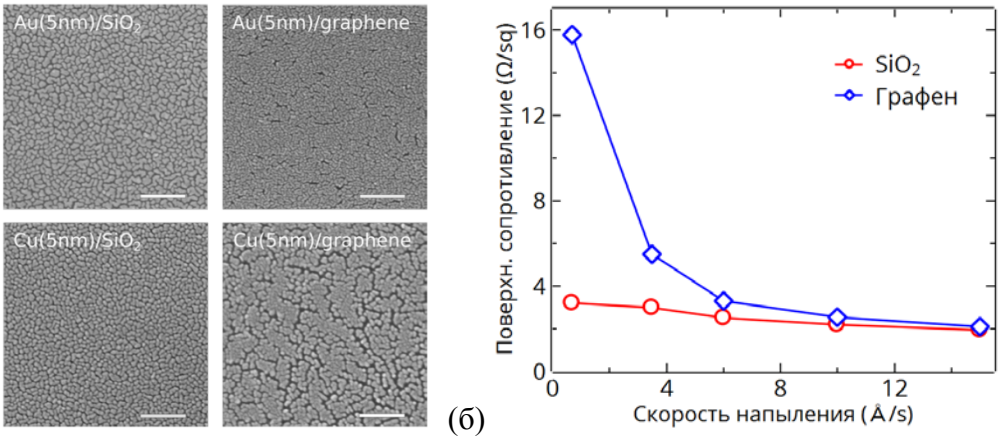


Рис. 1. (а) Изображения, полученные с помощью СЭМ, поверхности золотых и медных пленок толщиной 5 нм на графенеи SiO_2 (размер шкалы 200 нм). (б) Зависимость поверхностного сопротивления медных пленок толщиной 25 нм на графене и SiO_2 от скорости напыления

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-37-00308\18 мол_а.

Литература

1. *Grigorenko A.N., Polini M., Novoselov K.S.,* Graphene plasmonics // Nature Photon. 2012. V. 6. P. 749–758.
2. *Hodas M., Siffalovic P., Jergel M., Pelletta M., Halahovets Y., Vegso K., Kotlar M., Majkova E.,* Kinetics of copper growth on graphene revealed by time-resolved small-angle *x*-ray scattering // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. P. 035424.
3. *Volkov V.S., Yakubovsky D.I., Stebunov Y.V., Kirtaev R.V., Voronin K.V., Arsenin A.V.* Hybrid graphene-nanometallic structures // Journal of Physics: Conference Series. 2018. V. 1092.
4. *LiX., Zhu J., Wei B.,* Hybrid nanostructures of metal/two-dimensional nanomaterials for plasmon-enhanced applications // Chem. Soc. Rev. 2016. V. 45. P. 3145–3187.

УДК 538.958

Зарядовый транспорт и релаксация воды в биологических системах

***З.В. Гагкаева*[1], *К.А. Мотовилов*[1], *М. Савинов*[2], *В. Гриненко*[3], *З.В. Бедрань*[1], *Л.С. Кадыров*[1], *К. Сидорук*[4], *Е.С. Жукова*[1], *М. Дрессель*[1,5], *Б.П. Горшунов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences
[3]Institute for Metallic Materials, IFW Dresden
[4]Государственный научно-исследовательский институт генетики и селекции промышленных микроорганизмов
[5]Physikalisches Institut, Universität Stuttgart

Вода играет важнейшую роль в жизнедеятельности биологических систем: так, в белках вода участвует в ферментном катализе, регулируя реакции переноса протонов; вносит вклад в определение трехмерной структуры белка; осуществляет транспорт зарядов (протонов, ионов и косвенно электронов); образует гидратные оболочки вокруг белков и т. д. Однако значительная часть исследований, посвященных физическим свойствам биологических объектов, например, таким, как зарядовый транспорт, зачастую проводится без должного контроля влажности образцов.

В настоящей работе мы исследовали влияние присутствия воды на проводимость в разных биологических структурах. В качестве объектов были выбраны несколько разных биологических материалов: два белка с хорошо исследованными свойствами и структурой, цитохром с (CytC) и бычий сывороточный альбумин (BSA); меланин, биополимер с известным механизмом транспорта; а также внеклеточный матрикс и филаменты электрогенной бактерии *Shewanella oneidensis* MR-1

(ВМФ). Образцы исследовались с помощью диэлектрической спектроскопии в широком частотном (1 Hz–30 THz) и температурном (5–300 К) диапазонах, а также с помощью калориметрии при температурах от 5 К до 300 К.

Для всех образцов, кроме БСА, в терагерцовых спектрах поглощения была обнаружена обусловленная откликом воды дебаевская релаксация (отсутствие которой в БСА можно объяснить более связанным характером воды в этом белке). Наличие отклика воды в образцах согласовалось с признаками зарядового транспорта в низкочастотной области спектров. Кроме того, в спектрах и температурном поведении теплоёмкости образцов были обнаружены несколько других интересных особенностей, характерных для неупорядоченных неорганических сред: универсальный диэлектрический отклик, скейлинг, режим почти постоянных потерь (nearly constant losses) и бозонный пик.

Работа выполнена при поддержке программы 5-100, проекта № 3.9896.2017/BY и гранта визит-профессоров МФТИ.

Литература

1. *Bhattacharjee N., Biswas P.* Structure of hydration water in proteins: A comparison of molecular dynamics simulations and database analysis // Biophys. Chem. 2011. V. 158. P. 73.
2. *Malvankar N.S., Vargas M., Nevin K.P., Franks A.E., Leang C., Kim B.-C., Lovley D.R.* Tunable metallic-like conductivity in microbial nanowire networks // Nature Nanotechnology. 2011. V. 6. P. 573.
3. *El-Naggar M.* [*et al*.]. Electrical transport along bacterial nanowires from *Shewanella oneidensis* MR-1 // PNAS. 2010. V. 107. P. 18127.
4. *Mostert A.B., Powell B.J., Pratt F.L., Hanson G.R., Sarna T., Gentle I.R., Meredith P.* Role of semiconductivity and ion transport in the electrical conduction of melanin // PNAS. 2012. V. 109. P. 8943.
5. *Perticaroli S., Nickels J. D., Ehlers G., Sokolov A. P.* Rigidity, secondary structure, and the universality of the boson peak in proteins // Biophys. J. 2014. V. 106. P. 2667.

УДК 535.343.9

Плазмонные резонансы в системе «графен-металлические наностержни» для усиления ИК поглощения биомолекул

***В.Е. Кайдашев*[1], *Б.Н. Хлебцов*[2], *Е.И. Титова*[1], *А.Н. Былинкин*[1], *С.С. Жуков*[1], *Д.А. Свинцов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН

Для возбуждения плазмон-поляритонной волны в плёнке графена обычно используют периодическую металлическую дифракционную решётку, причём частота возбуждаемого в графене плазмона зависит от её периода. При приближении такой решётки к графену до расстояний много меньше длины волны свободного графенового плазмона (нескольких десятков нанометров) коллективные колебания электронной плотности в графене оказываются ограниченными под поверхностью металлической наноантенны, и энергия плазмона перестаёт распространяться вдоль поверхности и оказывается локализованной подобно тому как это происходит в интерферометре Фабри-Перо [1]. Спектральное положение таких локализованных резонансов зависит уже не от периода решётки, а от ширины нанополос, т.е. от характерного размера металлического нанообъекта.

Гибридные наноструктуры на основе графена и плазмонных оптических наноантенн являются платформой для создания биосенсоров способных усиливать ИК спектры поглощения молекул благодаря эффекту SEIRA (наведённое поверхностью усиление ИК поглощения) [2, 3] который является хорошей альтернативой/дополнением к широко распространённому методу SERS [4], но не для видимого/ближнего ИК, а для среднего ИК и ТГц диапазона частот 100-2000 cm^{-1} (~3-60 ТГц). Для возбуждения стоячих плазмонных возбуждений в этом диапазоне с помощью металлических антенных решёток характерная ширина металлического элемента должна быть ~50-1000 нм. Изготовления таких периодических металлических антенных решёток на макроскопических площадях (~1cm^2) методом электронной литографии является трудновыполнимой и дорогостоящей задачей.

Нами предложен новый подход к созданию SEIRA-подложки используя плазмонный резонанс, образующийся в результате локализации энергии в зазорах между слоем графена и изолированными наностержнями, предварительно изготовленными в растворе химическим

способом и квазиоднородно нанесёнными на макроскопическую поверхность сенсора. Действительно, в случае же SEIRA-подложки распространение поляритона в выделенном направлении не требуется, как это необходимо в плазмонных ТГц фотоприёмниках на базе полевого транзистора. Эффективность SEIRA-подложки определяется величина локального фактора усиления поля вблизи поверхности из расчёта на единицу площади и периодичность расположения отдельных наностержней в данном случае не является определяющим фактором.

Мы разрабатываем электрически настраиваемую SEIRA-подложку способную усиливать спектры поглощения биомолекул адсорбированных на её поверхности в диапазоне 100-2000 cm^{-1}. Для этого были изготовлены многослойные структуры графен/SiO2/Si на базе полевого транзистора с изолированным затвором, канал которого выполнен в виде монослоя графена. Уровень Ферми графена варьируется при приложении разности потенциалов между каналом и затвором транзистора. Слой графена в таких структурах покрыт сверхтонкими плёнками Al2O3 методом атомно-слоевого осаждения, толщина которых варьировалась в диапазоне 3-10 нм. Наностержни Au различной длины в диапазоне ~44-180 нм, изображённые на Рис. 1, синтезировались в растворе химическим методом и наносились на структуры с использованием предварительной химической функцианализации поверхности. Свойства гибридных плазмонных резонансов в системе "графен - металлические наностержни" изучались методом Фурье-спектроскопии поглощения в диапазоне 100-2000 cm^{-1} важном для построения SEIRA-биосенсоров.

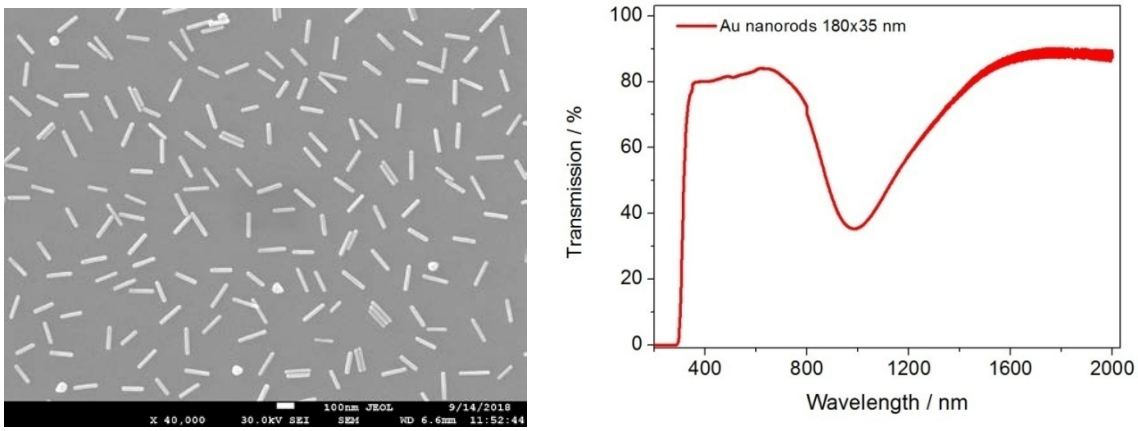


Рис. 1. SEM-изображение квазиоднородного массива Au наностержней изготовленных химическим методом и нанесённых на подложку SiO2/Si (a) и спектры оптического пропускания таких наностержней (b).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №16-29-03402\16

Литература

1. *Iranzo D. A., Nanot S., Dias E. J. C., Epstein I., Peng C., Efetov D.K., Lundeberg M. B., Parret R., Osmond J., Hong J. Y., Kong J., Englund D. R., Peres N. M. R., Koppens F. H.L.,* Probing the ultimate Plasmon confinement limits with a van der Waals heterostructure // Science 2018. V. 360 P. 291.
2. *Zhu Y., Li Z., Hao Y., Hone J., Yu N., Lin Q.,* Tunable Mid-Infrared Biosensors Based on Graphene Metasurfaces // IEEE, 2017, P. 1340, DOI: 10.1109/TRANSDUCERS.2017.7994304.
3. *Rodrigo D., Limaj O., Janner D., Dordaneh E., Abajo F. J. G., Pruneri V., Altug H.,* Mid-infrared plasmonic biosensing with graphene // Science 2015, V. 349 P. 165.
4. *Wu L, Wang W, Zhang W, Su H, Liu Q, Gu J, Deng T, Zhang D,* Highly sensitive, reproducible and uniform SERS substrates with a high desity of three-dimentionally distributed hotspots: gyroid-structured Au periodic metallic materials // NPG Asia Materials, 2018 V. 10 P. e462.

УДК 538.971

Расчёт энергетического состояния системы «адатом - поверхность» с учётом внешнего электрического и магнитного полей

А.К. Нухов[1,2,3]***, Г.М Мусаев***[3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт физики ДНЦ РАН
[3]Дагестанский государственный университет

Электрическое и магнитное поля могут повлиять на состояние поверхности с адсорбированными атомами. Это может быть выражено в изменении уровней поверхностной энергии [1], которые могут быть сдвинуты на определенную величину.

В таком случае, энергия хемосорбции немагнитного состояния в зависимости от расстояния S и приложенного электрического поля F будет:

$$E_{CH}(S,F) = E_M(S,F) + E_I(S,F) + E_{IF}(S,F) - \frac{1}{2}\alpha_i F^2 \qquad (1)$$

Третий член выражения (1) есть энергия, связанная с наличием эффективного заряда $|e|Z_{eff}(S,F)$ на расстоянии S от поверхности. Эта энергия может быть определена по формуле

$$E_{IF}(S,F) = e F \int_{S+S_o}^{0} Z_{eff}(S',F)dS' \qquad (2)$$

Четвертый член выражения (1) представляет собой энергию ионной поляризации, где α_i - коэффициент поляризации электрического диполя иона.

Энергия хемосорбции магнитного состояния в зависимости от расстояния S и приложенного поля F определяется аналогично, как и выражение (1), но с заменой α_A на α_i (где α_A есть коэффициент поляризации электрического диполя атома).

Наиболее важным вопросом является то, что представляет собой зарядовое состояние на поверхности в процессе адсорбции [2].

Мы провели расчёт числа заполнения для системы *Na/Ni*(110) в зависимости от расстояния, приложенного электрического поля, длины электронного отклика и эффектов корреляции.

Отметим, что мы изучали систему *Na/Ni*(110), поскольку она является одной из наиболее применяемых на практике систем. Она представляет собой состояние между $\phi_o > V_i$ и $\phi_o < V_i$ состояниями, т.е. мы можем получить два типа решений (магнитные $n_a^{\sigma} \neq n_a^{-\sigma}$ и немагнитные $n_a^{\sigma} = n_a^{-\sigma}$). Произведённый нами расчет числа заполнения $n_a^{\pm\sigma}$ соответствующих уровней энергии $E_a^{\mp\sigma}$ при S_o=0.987 A^o для различных значений приложенного электрического поля как функции внешнего поля показывает резко выраженные пики, как на расстоянии S=30 A^o, так и при S=0. Из этого расчёта следует, что число заполнений $n_a^{\pm\sigma}$ уменьшается (энергетические уровни адатома $E_a^{\mp\sigma}$ повышаются) для всех расстояний с ростом приложенного поля. Однако величина плотности состояний адатома уменьшается с увеличением приложенного поля на поверхности, где решения являются немагнитными ($n_a^{\sigma} = n_a^{-\sigma}$) независимо от того существует поле или нет.

Рисунок (2) показывает расчеты плотности состояний адатомов на расстоянии S=30 A^o от поверхности. Сравнение плотности состояний адатомов на расстоянии S=0 (см. рисунок(1)) и S= 30 A^o показывает, что если при S=0 плотность состояний адатомов на поверхности не зависит от того, приложено поле или нет, то в случае S=30 A^o плотность состояний адатомов зависит от наличия поля.

Расчеты энергии хемосорбции проведены также для двух решений, магнитных и немагнитных, для системы *Na/Ni*(110) в зависимости от расстояния и приложенного поля. В случае $\phi_o < V_i$ встречаются два состояния: ионные и атомные, которые пересекаются.

Это имеет важное значение в процессе десорбции, так как гарантирует, что основное состояние системы – это атомное состояние, т.е. $E_M > E_I$, когда атом находится далеко от поверхности и при ионном состоянии $E_M < E_I$ атом подходит к поверхности.

Можно сделать вывод, что ионной вклад в энергии хемосорбции E_{CH} (в энергию связи) преобладает при всех значениях приложенного поля, и этот вклад возрастает с ростом приложенного поля, в отличие от металлического вклада. Данные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [3].

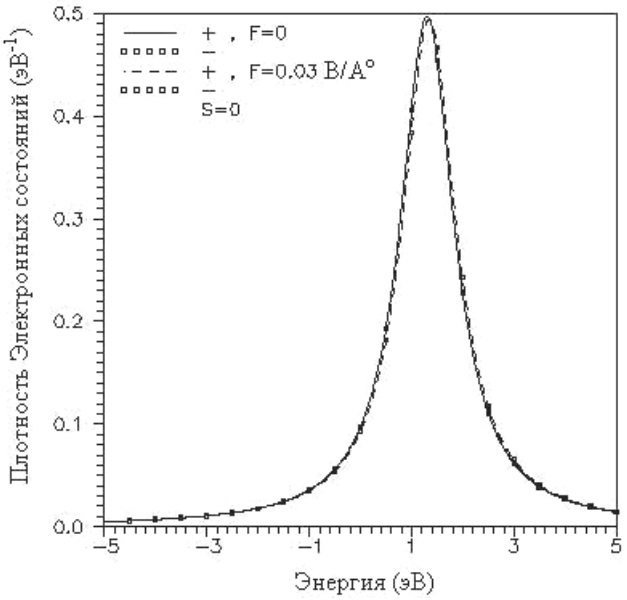


Рис. 1: Плотность состояний адатомов на поверхности (S=0)

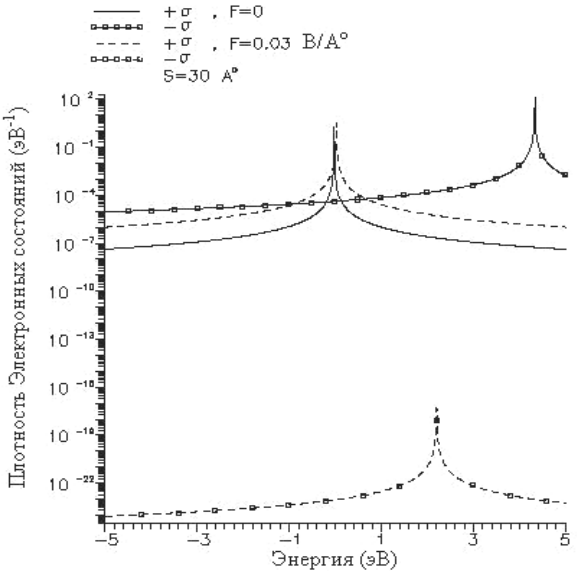


Рис. 2: Плотность состояний адатомов на расстоянии (S=30 A^o) от поверхности

Литература

1. *Tsong T.T.* Experimental studies of behavior of single adsorbed atoms on solid surfaces.// Rep.Progr.Phys. 1988. Vol. 51. №6. Pp. 759.
2. *Фадель Х.К., Нухов А.К., Мусаев Г.М.* Взаимодействие атом-поверхность: Влияние электрического поля на зарядовое состояние и потенциальную энергию поверхности.// Вестник Дагестанского государственного университета. 2012. Вып. 6. С. 54-60.
3. *Simic V., Heybe M. and et. al.* Substrate – Mediated Interaction and Electron –Induced Diffusion of Single Lithium Atoms on Ag (001).// Phys.Rev.B. 2007. Vol. 75. №19. Pp. 1954.

СЕКЦИЯ ПРИКЛАДНОЙ ОПТИКИ

Председатель: Ф.Ф. Каменец (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: А.И. Миланич (д.т.н., профессор)

Секретарь: А.З. Нусратуллин

Дата: 24.11.2018

Время: 10:00-13:00

Место: Долгопрудный, Первомайская ул., д. 3, ауд. 112 КПМ, МФТИ

УДК 532.783

Эффекты двухосного поверхностного потенциала при распределении профиля директора смектика С*, стабилизированного полимером

А.А. Кудрейко[1]***, Н.Г. Мигранов***[2]

[1]Башкирский государственный медицинский университет
[2]Институт механики им. Р.Р. Мавлютова, УФИЦ РАН

Дефекты в ограниченном объёме жидкокристаллической мезофазы смектик С* (SmC*) являются главными причинами ухудшения оптических характеристик в планарных ячейках. Причинами появления дефектов (напр., наклонные смектические слои) являются: температурная зависимость угла между наиболее вероятным направлением длинных осей молекул (директор) и нормалью к слою SmC* (θ-угол), а также нарушение баланса между полярными и неполярными взаимодействиями на подложках.

Теоретически и экспериментально ранее показано, что угол наклона смектических слоёв в поверхностно-стабилизированном сегнетоэлектрическим жидком кристалле (СЖК) зависит от коэффициентов так называемого двухосного поверхностного потенциала $f_s(\varphi)$ [1]. Данный потенциал объясняет экспериментально наблюдаемую гистерезисную зависимость поляризации ячейки от величины электрического поля. Оказалось, что количество минимумов потенциала $f_s(\varphi)$ определяется величиной двухосного параметра – отношение энергии сцепления, связанной с двухосностью к энергии сцепления директора с осью лёгкого ориентирования. Следовательно, нахождение граничных условий для решения теоретических задач на основе двухосного поверхностного потенциала позволит корректно рассчитать распределение профиля директора в ячейке СЖК.

В работе теоретически рассчитывается распределение поля директора в наклонной слоевой структуре SmC*. Модель при этом учитывает неоднородность распределения вектора спонтанной поляризации и возникновение зарядов вблизи подложек с плотностью $\rho = P_0 \sin\varphi\cos\delta\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}$, где P_0 – спонтанная поляризация, φ – азимутальный угол директора, δ – угол наклона слоевой структуры, а ось x перпендикулярна подложкам. Геометрия ячейки представлена, например, в работах [2, 3].

Для нахождения граничных условий и угла δ рассматриваются крутящие моменты $N_\varphi = -\partial f_s/\partial\varphi$ и $N_\delta = -\partial f_s/\partial\delta$. Приравняв эти моменты к соответствующим максимумам, мы приходим к системе связанных нелинейных уравнений, где δ и φ_s – неизвестные. Здесь φ_s – азимутальный угол директора на подложках. Решение данной системы уравнений позволяет однозначно рассчитать неизвестные углы δ и φ_s в отсутствие электрического поля. Тогда граничные условия могут быть записаны в виде

$$B\frac{\partial\varphi}{\partial x}-\frac{\partial f_s}{\partial\varphi}\bigg|_{x=0}=0,\quad B\frac{\partial\varphi}{\partial x}-\frac{\partial f_s}{\partial\varphi}\bigg|_{x=d}=0,$$

где d – толщина ячейки, а B – постоянная упругости.

Уравнение Лагранжа в одноконстантном приближении было получено минимизацией объёмной плотности свободной энергии: $f_b = f_{elas} + f_{elec} + f_{stab}$, где её слагаемые – это объёмные плотности энергий упругости, электрического поля, взаимодействия директора и полимерной сетки.

Уравнение баланса моментов для стационарного электрического поля можно записать следующим образом:

$$\gamma_\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\frac{d}{dx}\frac{\partial f_b}{\partial\varphi_{,x}}-\frac{\partial f_b}{\partial\varphi},$$

где γ_φ – коэффициент вращательной вязкости директора. Получив решение уравнения баланса моментов, можно построить семейство кривых – распределений профилей директора при разных значениях электрического поля и степени полимеризации.

Результаты моделирования такой системы показывают, что с увеличением электрического поля значения азимутальных углов $\varphi(0,t)\big|_{t\to\infty}$ и $\varphi(d,t)\big|_{t\to\infty}$ – постоянные величины. Это приводит к формированию вблизи подложек зон, где возникают большие градиенты спонтанной поляризации (рис. 1а).

Изменение степени полимеризации не приводит к значительным изменениям формы профиля директора. Это означает, что степень полимеризации СЖК незначительно влияет на светопропускание ячейки (рис. 1б). При этом полимерная сетка значительно улучшает устойчивость директора к механическим воздействиям.

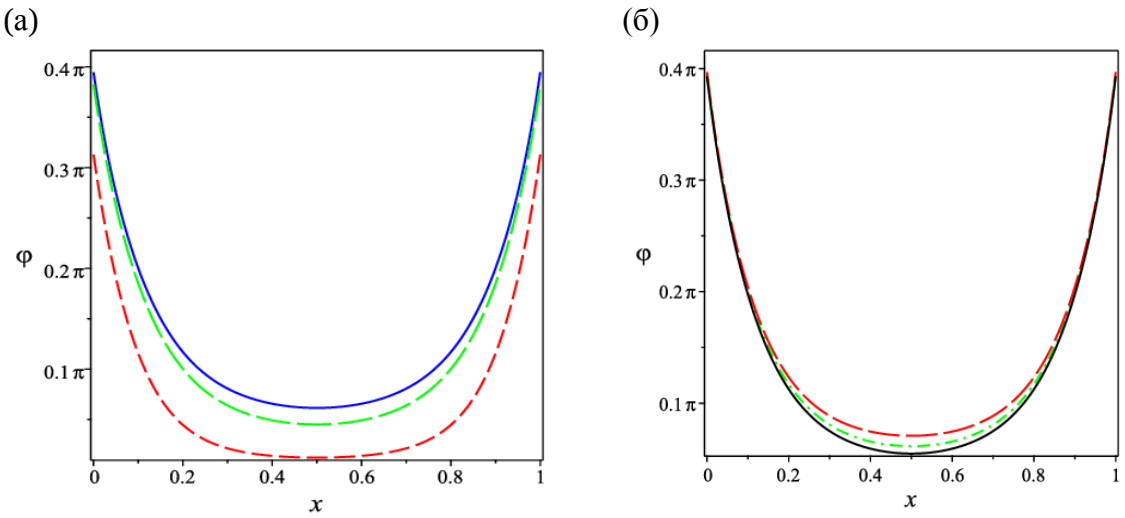


Рис. 1. Профили азимутальных углов директора в ячейке СЖК, стабилизированного полимером. (а) При возрастающем электрическом поле: $E=1$ МВ/м (сплошная кривая), $E=1.5$ МВ/м (длинно-пунктирная кривая) и $E=5$ МВ/м (пунктирная кривая) при степени полимеризации $\gamma_s d = 4.8\cdot10^{-4}$ Дж/м^2. (б) Если $E=1$ МВ/м, а степень полимеризации возрастает: $\gamma_s d = 1.6\cdot10^{-4}$ Дж/м^2 (сплошная кривая), $\gamma_s d = 4.8\cdot10^{-4}$ Дж/м^2 (штрих-пунктирная кривая) и $\gamma_s d = 9.6\cdot10^{-4}$ Дж/м^2 (длинно-пунктирная кривая).

Литература

1. *Kaznacheev A., Pozhidaev E., Rudyak V., Emelyanenko A. V., Khokhlov A.* Biaxial potential of surface-stabilized ferroelectric liquid crystals // Phys. Rev. E. 2018. V. 97. 042703.
2. *Meyere A., Pauwels H., Ley E.* Calculation of chevron profiles in ferroelectric liquid crystal cells // V. 14. 1269–1282.
3. *Kudreyko A., Migranov N., Migranova D.* Electrooptic response in thin smectic C* film with chevron structures // Chin. Phys. B. 2016. V. 25. 126101.

УДК 524.882, 524.86

Уточненная концепция черной дыры и ее минимальный размер

А.И. Миланич

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

«Вопрос о реальном существовании чёрных дыр тесно связан с тем, насколько верна теория гравитации, из которой следует их существование. В современной физике стандартной теорией гравитации, лучше всего подтверждённой экспериментально, является общая теория относительности (ОТО), уверенно предсказывающая возможность образования чёрных дыр» [1]. Эта цитата взята из Википедии.

С учетом того, что к экспериментам А. Эддингтона [2] (впервые подтвердившим ОТО) есть обоснованные претензии [3], вопрос как о экспериментальном подтверждении ОТО, так и о существования черных дыр актуален до сих пор.

Здесь мы не станем обсуждать возможность существования и свойства «квантовых» черных дыр [4], предполагающих наличие дополнительных пространственных измерений и т.д., а ограничимся рассмотрением лишь «астрофизических» черных дыр.

Большинство вопросов возникает при исследовании свойств и параметров именно этих черных дыр. Например, закономерен вопрос: какой минимальный размер (масса) необходимы для образования черной дыры? Астрономы предполагают существование некоторого порога массы звезды в диапазоне 1,7–2,7 масс Солнца. Лишь тогда после своей «смерти» звезда в состоянии «родить» черную дыру или нейтронную звезду. Пока на такие вопросы физика не дает однозначного ответа, и существуют различные точки зрения.

Но сначала обратимся к истории. Впервые понятие черной дыры ввел в 1784 году Джон Мичел (Jhon Michell) [5] (он использовался термин «черная звезда»). Для фотона массы **m** в поле звезды массы M была записана 2-я космическая скорость:

$$\frac{mc^2}{2} = GmM / r \tag{1}$$

$$r = \frac{2GmM}{c^2} \tag{2}$$

где G – ньютоновская гравитационная постоянная и c – скорость света

Следовательно, в рамках классической механики при расстоянии меньше **r** фотон не в состоянии преодолеть гравитацию и улететь на бесконечное расстояние. Случайно это расстояние совпало с радиусом Шварцшильда в общей теории относительности А. Эйнштейна.

Сразу заметим, что применение ньютоновской гравитационной постоянной для фотона не корректно, поскольку G измерялась только для адронов (т.е. протонов и нейтронов). А фотон - это бозон и применение единой гравитационной постоянной справедливо лишь в рамках ОТО [3], когда фотон не имеет массы и только прочерчивает геодезические линии.

Однако все вышесказанное не помешало А. Эддингтону при проверке справедливости ОТО сравнить ожидаемое отклонение 1,75″ света звезд гравитацией Солнца с рассчитанным Зольднером в 1804 году [6] вдвое меньшим отклонением 0,87″ в рамках кеплеровского движения фотона по гиперболе, да еще с переменной скоростью, что противоречит специальной теории относительности (СТО).

За прошедшие столетия наши представления о природе значительно расширились, но даже в 1919 году сравнение результатов ОТО с результатами Зольднера (противоречащими СТО) выглядят не убедительными.

Перечисленные выше аргументы ставят под сомнение саму концепцию черной дыры, существующую в рамках ОТО с горизонтом событий на сфере Шварцшильда, с остановкой времени и т.д.

Но существует и другое более серьезное возражение против концепции «астрофизической» черной дыры. А именно: небольшую **черную дыру просто нечем заполнить!** Поясним, что имеется в виду.

Это редко обсуждаемое возражение против возможности существования черных дыр, а именно гигантская плотность вещества внутри неё или проблема сингулярности. Использование красивых терминов «сингулярность» или «ядерно-электронной плазмы» не решает проблему. В физике

отсутствие ограничения на любую физическую величину (ее бесконечное значение) указывает на ошибочность теории, но почему-то этот принцип не распространяют на плотность вещества внутри черной дыры.

Проведем простой расчет. Радиус Шварцшильда для Солнца около 3 км. Масса Солнца $1{,}989 \cdot 10^{30}$ кг, что соответствует плотности вещества в чёрной дыре с массой Солнца не менее (нижний предел) $5 \cdot 10^{19}$ кг/м^3. Для сравнения масса протона $1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг при его размере $8{,}4 \cdot 10^{-16}$ м соответствует плотности 3 10^{18} кг/м^3, что на порядок меньше плотности, необходимой для существования описанной выше черной дыры. Отметим, что плотность протона (и нейтрона) – максимальные плотности вещества в нашей Вселенной, и плотность атомных ядер уже на порядок меньше плотности протона. Использование в качестве предельной «Платковской плотности» 10^{97} кг/м^3 [4] некорректно хотя бы потому, что нет никаких экспериментальных доказательств существования Платковского предела длины и массы Платковской частицы.

Куда логичнее предположить, что существуют ограничения на размеры и массы чёрных дыр, поэтому в рамках ОТО черную дыру с массой Солнца просто нечем заполнить! Прежде такие ограничения на размер и массу черной дыры обсуждались редко и до сих пор существуют проекты создания «малых» черных дыр на «лабораторном столе» [4].

Таким образом, даже если минимальную чёрную дыру заполнить «чистыми» протонами (нейтронами), то это возможно начиная с масс примерно в четыре раза больше массы Солнца. Этот труднодостижимый нижний предел для массы черной дыры косвенно подтверждают последние астрономические наблюдения. Утверждается, что обнаружена самая маленькая чёрная дыра с массой 3,8 масс Солнца (объект XTE J1650-500) размером (радиус Шварцшильда) 12 км [8], что формально хорошо совпало с предложенной выше оценкой.

И все же остается открытым вопрос: что за субстанция заполняет черную дыру? Черная дыра – это гигантский атом? Но ядерная физика доказала, что тяжёлые ядра неустойчивы (см. формулу Вайцзеккера). Кроме того, периодическая таблица Менделеева ограничена 137 элементами [8], поскольку затем у более тяжелых ионов скорость электрона на первой Боровский орбите превышает скорость света! А просто замена терминов («сингулярность» и т.п.) не решает проблему…
Необходимы новые эксперименты.

К счастью, оказалось, что некоторые эксперименты уже «выполнены» природой, но были неверно истолкованы.

Например, недавно установлено, что окрестности гигантской черной дыры в центре нашей галактики (Млечный Путь) излучают электромагнитное излучение в широком диапазоне длин волн [9]. Но согласно современным космологическим моделям, черные дыры (точнее вещество в их окрестностях) излучают свет только во время формирования этих черных дыр, поглощая близрасположенные газы. Согласно расчетам, этот процесс в центре нашей галактики закончился миллионы лет тому назад. Поэтому, объясняя это излучение, говорят о новом поступлении вещества в окрестность черной дыры. Но проще предположить, что согласно рассмотренной в [8] модели фотонов переменной массы излучение от звезд за черной дырой просто в состоянии пересекать сферу Шварцшильда...
В любом случае необходимы прямые эксперименты, а не только расчет!

Литература

1. URL - https://ru.wikipedia.org/wiki/Чёрная_дыра
2. *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.
3. *Миланич А.И.* Анализ экспериментов по отклонению света гравитацией Солнца /// Труды 60 научной конференции. Секция прикладной оптики. Москва–Долгопрудный–Жуковский, 2017. С. 50–52.
4. *Bernard J. Carr and Steven B. Giddings* Quantum Black Holes // Scientific American. 2005. May. P. 48–55.
5. URL - https://ru.wikipedia.org/wiki/Чёрная_дыра «Чёрная_звезда»_Мичелла
6. *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
7. *Shaposhnikov N., Titarchuk L.* Determinztion of black hole masses in classic black hole binaries using scaling of spectral and variability characteristics // The Astrophysical Journal. 2009, July 1. V. 699. P. 453–468.
8. *Миланич А.И.* Фотоны, закон сохранения энергии и не только // Инженерная физика. 2016. № 9. С. 81–85.
9. *Russell C. M.P., Wang Q.D, Cuadra J.* Modelling the thermal X-ray emission around the Galactic Centre from colliding Wolf-Rayet winds // arXiv:1607.01562v3 [astro-ph.HE] 1 Aug 2017.

УДК 535.8

Измерение квантового выхода синглетного кислорода в растворах бактериохлоринов

***Н.В. Малимоненко*[1,2], *А.П. Галов*[1,2], *И.Б. Местер*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]ФГУП ГНЦ "НИОПИК"

Бактериохлорины (БХ) являются перспективными фотосенсибилизаторами (ФС) для лечения ряда злокачественных опухолей методом фотодинамической терапии (ФДТ) [1]. ФС вводится в опухоль, после чего она облучается светом в красной или в ближней ИК-области спектра в полосу поглощения ФС. При этом образуются активные формы кислорода (в первую очередь, синглетный кислород), и клетки опухоли повреждаются в результате фотохимического окисления биоструктур. Преимуществом БХ является наличие у них поглощения в ближней ИК-области спектра, где свет глубже проникает в биоткань. В данной работе мы измерили квантовый выход синглетного кислорода для двух представителей класса БХ.

Для исследования были взяты водные растворы производных БХ – тетрабромида и тетратозилата. В качестве субстрата окисления был использован фурфуриловый спирт, который является эффективной химической ловушкой для синглетного кислорода $^1O_2$ и в то же время не реагирует с пероксидами, гидрокси- и другими кислородными радикалами [2]. Скорость реакции фотоокисления определялась по скорости убывания концентрации растворенного кислорода, датчиком которой служила пленка из полистирола, допированного мезо-тетрафенил-тетрабензопорфином палладия [3]. Это соединение обладает фосфоресценцией, интенсивность и время жизни которой зависит от концентрации растворенного кислорода. Пленка сенсора наносилась на внутреннюю поверхность прозрачного сосуда с исследуемым раствором. Его фосфоресценция возбуждалась импульсами (длительность 0.2 мкс, энергия – 1 мкДж, частота следования – 50 Гц) He-Ne лазера (λ = 633 нм). Кинетика затухания фосфоресценции регистрировалась и обрабатывалась с помощью фотоумножителя, аналогово-цифрового преобразователя и компьютера. Калибровка датчика осуществлялась помещением его в среды с известным содержанием кислорода (воздух и чистый аргон). Возбуждение БХ производилось излучением диодного лазера (λ = 776 нм). Квантовый выход $^1O_2$ определялся с учетом известной величины константы скорости окисления фурфурилового спирта синглетным кислородом [2].

Результаты измерения квантового выхода $^1O_2$ для двух БХ приведены в табл. 1.

Из таблицы видно, что БХ тетратозилат обладает значительно более высоким квантовым выходом $^1O_2$, следовательно, по этому параметру он предпочтительнее для применения в качестве ФС для ФДТ.

Таблица 1.

№ опыта	Фотосенсибилизатор	Концентрация ФС, мкМ	Квантовый выход $^1O_2$
1	БХ тетратозилат	137	0,38
2	БХ тетратозилат	40	0,44
3	БХ тетрабромид	75	0,14
4	БХ тетрабромид	75	0,15

Литература

1. *Huang Y-Y., Balasubramanian T., Yang E., Luo D., Diers J.R., Bosian D.F., Lindsey J.S., Holten D., and Hamblin M.R.* Stable Synthetic Bacteriochlorins for Photodynamic Therapy: Role of Dicyano Peripheral Groups, Central Metal Substitution (2H, Zn, Pd), and Cremophor EL Delivery // ChemMedChem. 2012.V. 7(12). P. 2155–2167.
2. *Haag W.R., Hoigné J., Gassman E., Braun A.M.* Singlet Oxygen in Surface Waters – Part I: Furfuryl Alcohol as a Trapping Agent // Chemosphere 1984. V. 13. P. 631–640.
3. *Vinogradov S.A., Lo L-W., Jenkins W.T., Evans S.M., Koch C. and Wilson D.F.* Noninvasive Imaging of the Distribution in Oxygen in tissue In Vivo Using Near-Infrared Phosphors // Biophysical Journal 1996. V. 70. P. 1609–1617.

УДК 53.082.52

Концепция гетеродинного спектрометра среднего ИК-диапазона для исследования планетных атмосфер

В.В. Мещеринов, О.В. Бендеров, С.В. Малашевич, Т.С. Тебенева, А.В. Родин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Мы представляем концепцию инструмента HISPAR (Heterodyne Infrared Spectrometer for Planetary Atmospheres Research) – гетеродинного спектрометра для исследования планетных атмосфер на основе квантово-каскадного лазера (ККЛ) с распределенной обратной связью [1], работающего в средней инфракрасной области спектра. Прибор может быть установлен на инфракрасных телескопах метрового класса для наблюдения атмосфер планет со сверхвысоким спектральным разрешением. Особенностью предложенной концепции являются компактная конструкция, которая может быть достигнута за счет применения волокон, разработанных для среднего ИК-диапазона. Впервые планируется применение волоконных разветвителей для среднего ИК-диапазона. Налаженной технологии производства волокон с малыми потерями для этого участка спектра, а также технологии создания разветвителей таких волокон пока не разработано. Стоит отметить большой прогресс в развитии халькогенидных волокон в последние годы [2].

В качестве чувствительного широкополосного смесителя планируется использование болометра на горячих электронах (HEB), также прорабатываются варианты применения других малораспространенных высокочувствительных детекторов. Прецизионная динамическая стабилизация частоты излучения лазерного источника будет осуществляться по реперной спектральной линии поглощения исследуемого газа.

Основное преимущество сверхвысокого спектрального разрешения при анализе спектров исходящего излучения планет связано с возможностью получения подробной информации о составе, структуре и фотохимической кинетике их атмосфер. Спектральное разрешение $\lambda/\Delta\lambda \sim 10^8$, обеспечиваемое гетеродинным детектированием инфракрасного излучения, позволяет проводить измерения ветра на разных высотах по доплеровскому сдвигу. Наиболее важными задачами, которые предстоит решить с помощью прибора HISPAR, являются определение вертикальных профилей температуры и скорости ветра на Марсе и Венере, интегральные и вертикальные измерения концентрации малых газовых составляющих на Марсе и Венере, измерение скорости ветра и температурных профилей в атмосферах планет-гигантов и спутника Сатурна Титана. Эти данные позволят рассчитать тепловой баланс и восстановить динамику атмосфер, что необходимо для валидации и настройки численных моделей глобальной циркуляции атмосфер этих планет.

К настоящему времени нашей группой разработана схема гетеродинного спектрометра для наблюдений в условиях обсерватории. Создан лабораторный макет прибора. Был спроектирован и изготовлен вакуумированный охлаждаемый корпус ККЛ с распределенной обратной связью, используемого в качестве локального осциллятора. Разработано многопотоковое программное обеспечение на базе платформы LabView для управления лабораторным макетом прибора и обработки результатов, а также для проведения реальных астрономических наблюдений в автоматическом режиме.

Продемонстрирован эффект гетеродинирования при смешении излучения АЧТ и лазерного излучения. При этом уровень чувствительности приема гетеродинного сигнала на уровне десятикратного квантового предела. Получены результаты по наблюдению линии поглощения в гетеродинном режиме, имитирующем наблюдения линии поглощения в континуальном спектре астрономического источника.

Теоретическим пределом чувствительности гетеродинного спектрометра является квантовый предел, определяющийся дробовыми шумами локального осциллятора. Были экспериментально определены шумовые характеристики системы в терминах шумовой температуры. В случае использования CdHgTe-фотодетектора шумовая температура составила $T_{noise} \approx 10^4$ К (при квантовом пределе 1845 К). Данный результат определяется высоким уровнем шумов быстродействующих CdHgTe-фотодетекторов с термоэлектрическим охлаждением и сопоставим с результатами, полученными другими группами [3]. Шумовая температура единственного на сегодня применяемого в астрономических наблюдениях гетеродинного спектрометра составляет 3000 К [4].

Таблица 1.

Характеристики разрабатываемого прибора

Спектральный диапазон	5.4 мкм, 7.78 мкм, 10.4 мкм
Полоса пропускания детектора	~3 ГГц (HEB), 850 МГц (CdHgTe)
Анализатор спектра	Цифровой FFT-спектрометр (разрешение - 76 кГц, полоса приема до 5 ГГц)
Сигнал/шум	~10 дробовых пределов ККЛ (CdHgTe) ~2 дробовых предела ККЛ (HEB)

Литература

1. *Faist J.* [*et al.*] Quantum cascade laser //Science. 1994. V. 264. N 5158. P. 553–556.
2. *Stevens G.* [*et al.*] Mid-IR fused fiber couplers //SPIE LASE. – International Society for Optics and Photonics, 2016. P. 973007–973007–8.
3. *Weidmann D.* [*et al.*] Hollow waveguide photomixing for quantum cascade laser heterodyne spectro-radiometry //Optics express. 2011. V. 19. N 10. P. 9074–9085.
4. *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.

УДК 520.84

Компактный лазерный гетеродинный спектрометр ближнего ИК-диапазона для прецизионных измерений контура линии CO_2 в столбе атмосферы Земли

С.Г. Зеневич[1]***, Д.В. Чурбанов***[1]***, И.Ш. Газизов***[1]***, А.В. Родин***[1,2]

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

Развитие климатических моделей и основанные на их результатах практические методики оценки естественного и антропогенного воздействия на климатическую систему требует применения все более точных инструментов для определения химического состава атмосферы. В частности, для оценки интенсивности эмиссии парниковых газов (ПГ), таких как CO_2, CH_4, N_2O и NO, требуется измерение их содержания в атмосфере с субпроцентной точностью.

В 2004 году по инициативе США для валидации спутниковых данных была основана сеть глобальных мониторинговых станций TCCON [1] на основе фурье-спектрометров Bruker-125HR. Эти станции способны восстанавливать вертикальное распределение основных парниковых газов с высокой точностью, однако имеющиеся тридцать 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 компактный гетеродинный спектрометр ближнего ИК-диапазона для прецизионных измерений контура линии поглощения CO_2 в столбе атмосферы. Впервые описание спектрометра было опубликовано в 2014 году [4]. В представляемой 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.

Также в работе будут представлены результаты полевых измерений спектров пропускания атмосферы в области 1,605 мкм и результаты моделирования по восстановлению вертикального профиля концентрации CO_2 и высотного профиля скорости ветра вплоть до верхней границы стратосферы. Эксперимент проводился в г. Долгопрудном, на крыше корпуса прикладной математики МФТИ. Результаты решения обратной задачи восстановления вертикального профиля

ветра качественно соответствуют данным аэрологического зондирования и результатам реанализа модели ERA-Interium [5]

Литература

1. *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.
2. *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.
3. *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.
5. *Dee D.P., Uppala S.M., Simmons A.J., Berrisford P., Poli P., Kobayashi S., Andrae U., Balmaseda M.A., Balsamo G., Bauer P., Bechtold P., Beljaars A.C.M., van de Berg L., Bidlot J., Bormann N., Delsol C., Dragani R., Fuentes M., Geer A.J., Haimberger L., Healy S.B., Hersbach H., Hólm E.V., Isaksen L., Kållberg P., Köhler M., Matricardi M., McNally A.P., Monge-Sanz B.M., Morcrette J.-J., Park B.-K., Peubey C., de Rosnay P., Tavolato C., Thépaut J.-N. and Vitart F.Q.* The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system // J. R. Met. Soc. 2011. V. 137. P. 553–597.

УДК 535.92

Моделирование квазинекогерентной рефлектограммы в фазочувствительном рефлектометре с распределённым рамановским усилителем

Д.Р. Харасов

Московский физико-технический институт (государственный университет)
ООО «Т8»

Фазочувствительные рефлектометры (Ф-OTDR) находят широкое применение в качестве распределённых датчиков температурных и механических (акустических) воздействий. Чувствительным элементом Ф-OTDR является оптическое волокно, в которое посылаются зондирующие импульсы. Ф-OTDR регистрирует рассеянное на неоднородностях излучение, распространяющееся в обратном направлении (рефлектограмма). За счёт того, что неоднородности распределены случайным образом, регистрируемая быстрым фотоприёмником рефлектограмма сильно изрезана.

При распространении в волокне зондирующий импульс и обратнорассеянный сигнал затухают. Данный факт ограничивает дальность работы Ф-OTDR порядка 40–50 км. Одним из способов увеличения дальности работы Ф-OTDR является использование распределённых рамановских усилителей (РУ) [1], принцип действия которых основан на эффекте вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР): в волокно вводится излучение накачки, частота которого меньше на ≈ 13 ТГц, чем частота зондирующего излучения. По мере распространения в волокне и зондирующий импульс, и сигнал обратного рассеяния усиливаются за счёт ВКР. Ранее автором в [2, 3] было показано, как изменяются рефлектограмма, форма зондирующего импульса и дальность работы прибора при использовании РУ.

При усреднении по достаточную большому участку, когерентная рефлектограмма становится значительно менее изрезанной (квазинекогерентная рефлектограмма) и с хорошей точностью совпадает с рефлектограммой некогерентного рефлектометра. В данной работе моделируется мощность обратного рассеяния в некогерентном рефлектометре при использовании РУ. Взаимодействие зондирующего импульса и накачки описываются следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial P_s(\mathrm{z},\mathrm{t})}{\partial \mathrm{z}} - \dfrac{1}{v_{g\,s}} \dfrac{\partial P_s(\mathrm{z},\mathrm{t})}{\partial t} = -\alpha_s P_s(\mathrm{z},\mathrm{t}) + g_R(f_p - f_s) P_s(\mathrm{z},\mathrm{t}) P_p(\mathrm{z},\mathrm{t}), \\ \dfrac{\partial P_p(\mathrm{z},\mathrm{t})}{\partial \mathrm{z}} - \dfrac{1}{v_{g\,p}} \dfrac{\partial P_p(\mathrm{z},\mathrm{t})}{\partial t} = -\alpha_p P_p(\mathrm{z},\mathrm{t}) - \dfrac{f_p}{f_s} g_R(f_p - f_s) P_s(\mathrm{z},\mathrm{t}) P_p(\mathrm{z},\mathrm{t}), \end{cases}$$

где нижние индексы s и p относятся соответственно к зондирующему импульсу и накачке, P – мощность, α – затухание в волокне, f – частота света, v_g – групповая скорость, g_R – коэффициент ВКР [4]. Так если мощность обратнорассеянного сигнала $P_{bs}(z)$ много меньше мощности накачки, то при усилении обратнорассеянного сигнала истощением накачки можно пренебречь. Тогда их взаимодействие описывается следующим уравнением:

$$\begin{cases} \dfrac{dP_{bs}(z)}{-dz} = -\alpha_s P_{bs}(z) + g_R(f_p - f_s)P_{bs}(z)P_{p0}\exp(-a_p z), \\ P_{bs}(z_0) = RS \cdot P_s(z_0), \end{cases}$$

где минус в производной обозначает направление распространения в обратную сторону по сравнению с зондирующим импульсом, RS – коэффициент обратного релеевского отражения для волокна. На рис. 1 показаны результаты моделирования некогерентной рефлектограммы в сравнении с когерентной и квазинекогерентной рефлектограммами. Совпадение теории с экспериментом удовлетворительное. Небольшое несовпадение среднего уровня с моделированием на 85–100 км связано с тем, что нижняя часть рефлектограммы достигает уровня технического шума (–40 дБ).

Показано, что с помощью моделирования некогерентной рефлектограммы можно с хорошей точностью оценить средний уровень рефлектограммы и его увеличение при использовании РУ. Также модель позволяет найти оптимальные параметры Ф-OTDR и РУ для максимального увеличения дальности работы Ф-OTDR.

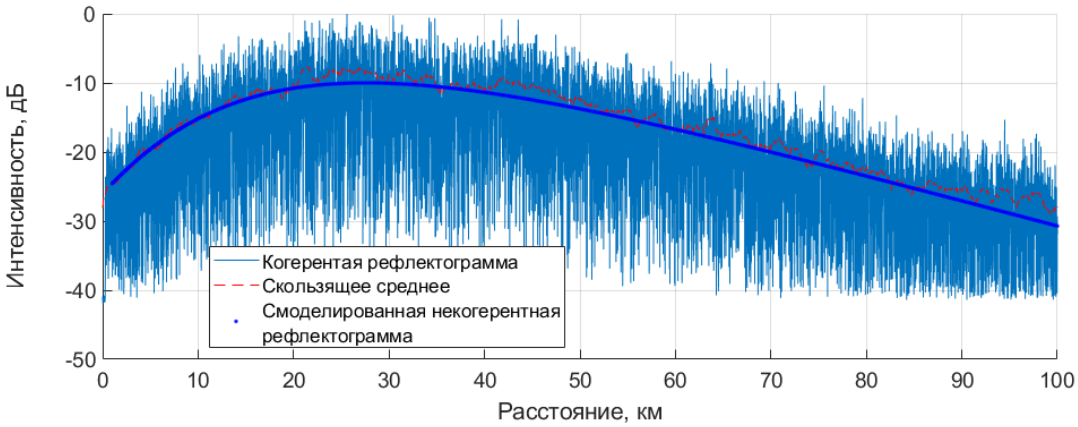


Рис. 1. Когерентная и усреднённая (квазинекогерентная) рефлектограммы в сравнении с результатом моделирования некогерентной рефлектограммы

Литература

1. *Martins H. F.* [*et al.*]. Phase-sensitive optical time domain reflectometer assisted by first-order Raman amplification for distributed vibration sensing over> 100 km //Journal of Lightwave Technology. 2014. V. 32. N 8. P. 1510–1518.
2. *Харасов Д.Р., Кузьменков А.И., Горбуленко В.В., Никитин С.П., Наний О.Е., Трещиков В.Н.* Увеличение дальности работы когерентного рефлектометра с использованием романовского усилителя // 4 международная конференция «Инжиниринг & Телекоммуникации - En&T 2017». 29–30 ноября, 2017. Сборник тезисов. – С. 126–129.
3. *Kharasov D. R.* [*et al.*]. Operating range limitations of the Phase-Sensitive Optical Time-Domain Reflectometer assisted by Raman amplifiers //2018 International Conference Laser Optics (ICLO). IEEE, 2018. P. 285–285.
4. *Shikhaliev I. I.* [*et al.*]. A simple method of measuring the effective SRS coefficient in single-mode optical fibres and its applicability limits //Quantum Electronics. 2017. V. 47. N 10. P. 906.

УДК 621.39.082.5

Исследование ВКР-перекоса DWDM-каналов с разными типами модуляции

***Л.А. Самоделкин*[1,3], *Д.Д. Старых*[1,2], *И.И. Шихалиев*[1,2], *О.Е. Наний*[1,3], *В.Н. Трещиков*[1]**

[1] ООО «Т8»
[2] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

В многоканальных системах связи со спектральным мультиплексированием (DWDM) вынужденное комбинационное (рамановское) рассеяние (ВКР) приводит к усилению длинноволновых каналов за счет энергии более коротковолновых каналов [1]. Данное явление должно учитываться при проектировании современных 80- и 40-канальных волоконно-оптических линий связи (ВОЛС), где необходима точная информация о зависимости величины ВКР-перекоса спектра от параметров линии [2].

В области малых частотных сдвигов (4 ТГц) рамановский коэффициент g_r линейно зависит от частотного интервала между взаимодействующими каналами [3] (Рис. 1а). При этом на выходе линии спектр искажается таким образом, что возникает линейный перекос в логарифмическом масштабе (Рис. 1б). Поэтому количественно этот нелинейный эффект можно охарактеризовать величиной перекоса или наклона выходного спектра [4]:

$$\delta(\Delta p)[\partial Б] = 4.34\frac{dg_r}{d\nu}\Delta\Omega L_{eff}P_s^0 = \chi_r\Delta\Omega L_{eff}P_s^0, \quad (1)$$

где $\delta(\Delta p)$ – отношение мощностей крайних спектральных компонент сигнала, $\frac{dg_r}{d\nu}$ – наклон спектральной зависимости коэффициента ВКР, $\Delta\Omega$ – полная ширина спектра сигнала, P_s^0 – суммарная входная мощность в линию.

$$L_{eff} = \frac{1}{\alpha_s}[1-\exp(-\alpha_s L)] \quad \text{– эффективная длина,} \quad (2)$$

где α_s – коэффициент затухания в волокне, L – длина линии.

В настоящей работе измерялся введенный в формуле (1) коэффициент ВКР-перекоса χ_r, не зависящий от мощности сигнала, длины линии, ширины спектра, описывающий лишь нелинейные характеристики волокна.

До настоящего времени считалось, что формат модуляции не влияет на ВКР-перекос, а для моделирования канальной нагрузки применим отфильтрованный шум ASE (Amplified Spontaneous Emission). Нами было проведено экспериментальное исследование влияния форматов модуляции: AM, DP-QPSK, 16-QAM, – на ВКР-перекос.

Для каналов с фазовой модуляцией, как и для каналов, эмулированных с помощью шума ASE эрбиевого усилителя, отклонение от линейного перекоса в выходном спектре не наблюдается. При использовании в линии амплитудно-модулированных каналов отмечены девиации в форме выходного спектра (Рис. 2а). В этих случаях различие значений χ_r приводит к расхождению перекосов в С-диапазоне (4 ТГц) не более чем в 1 дБ.

Наибольшие отклонения от линейного перекоса спектра, штраф порядка 1 дБ, обнаружены при добавлении к каналам без частотной модуляции канала с частотной модуляцией (чирп) (Рис. 2б). Чирпирование применяется для компенсации хроматической дисперсии, при этом у частотно-модулированного импульса при распространении по волокну уменьшается длительность и увеличивается пиковая мощность. ВКР-усиление сигнала описывается следующими формулами:

$$\begin{cases} \dfrac{dP_S}{dz} = \dfrac{g_r}{A_{eff}}P_P P_S - \alpha_S P_S, \\ \dfrac{dP_P}{dz} = -\dfrac{g_r}{A_{eff}}P_P P_S \,\omega_P \big/ \omega_S - \alpha_P P_P, \end{cases} \quad (3)$$

где α_S, α_P – коэффициенты затухания в волокне и P_S, P_P – мощности на частоте накачиваемого (ω_S) и накачивающего (ω_P) каналов, A_{eff} – эффективная площадь основной моды, z - координата вдоль волокна [5]. Как видно из скоростных уравнений (3), если коэффициент рамановского усиления зависит от мощностей сигнала и накачки, то такой импульс сильнее накачивает каналы с большими длинами волн, а сам же, вследствие большего истощения накачки, слабее усиливается коротковолновыми сигналами.

Из всего вышесказанного следует, что ВКР-перекос амплитудно-модулированных каналов имеет отклонения от линейной тренда, которые достигают наибольшей величины при применении в одной ВОЛС чирпированных и не чирпированных сигналов. Поэтому в последнем случае не корректно описывать выходной спектр в терминах линейного ВКР-перекоса. Для наилучшего описания выходного спектра линейным перекосом рекомендуется спектрально группировать каналы по типам модуляции.

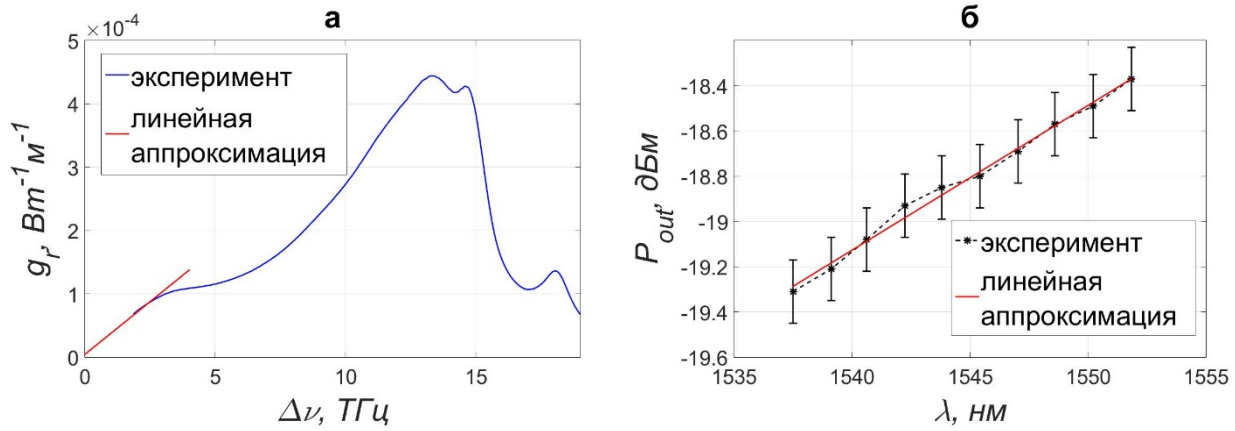


Рис. 1. Зависимость g_r от частотного сдвига (а), перекос выходного спектра (б)

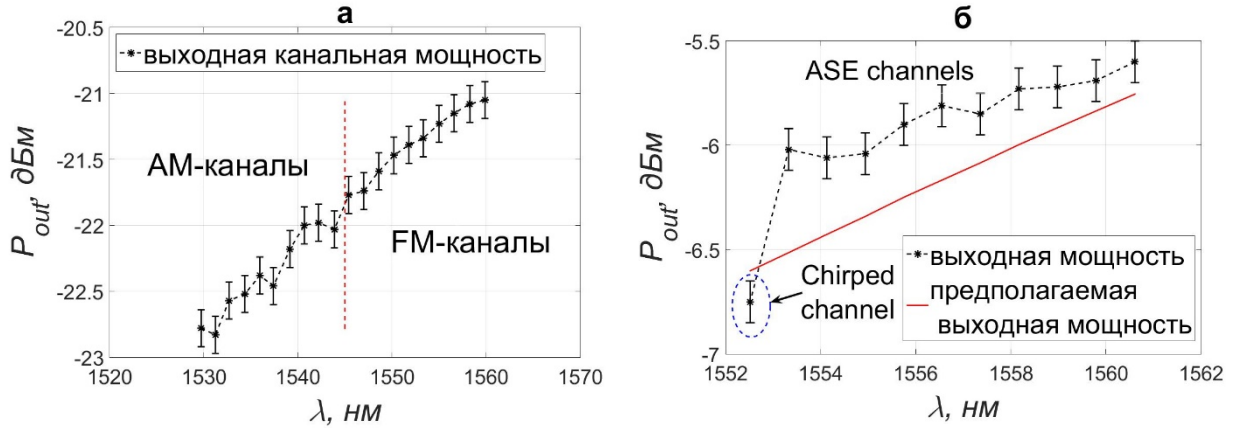


Рис. 2. Перекос выходного спектра для амплитудно-модулированных (АМ) и фазовомодулированных (ФМ) каналов (а), искажение перекоса выходного спектра при добавлении чирпированного канала (б)

Литература

1. *Agrawal G.P.* Fiber-Optic Communications Systems. - New York: John Wiley & Sons Inc., 2002.
2. *Капин Ю.А.* [*и др.*] Прямое экспериментальное измерение ВКР-перекоса спектра в многоканальных многопролетных системах связи // Квантовая Электроника, 2012. Т. 42. №. 9. С. 818–821.
3. *Chraplyvy A.R.* Optical power limits in multi-channel wavelength-division-multiplexed systems due to stimulated Raman scattering // Electron. Lett. 1984. Vol. 20. N 2. P. 58.
4. *Christodoulides D.N., Jander R.B.* Evolution of stimulated Raman crosstalk in wavelength division multiplexed systems // IEEE Photonics Technol. Lett. 1996. Vol. 8. N 12. P. 1722–1724.
5. *Headley C., Agrawal G.P.,* Raman Amplification in Fiber Optical Communication Systems. San Diego: Elsevier Academic Press, 2005.

УДК 539.219.1, 535.8

Описания динамики излучения криогенного лазера на основе аналога матрицы Шпольского

А.И. Миланич[1,2]***, Д.Ю. Ципенюк***[2]***, А.В. Воропинов***[3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[3]ООО «Лазер График»

Под эффектом Шпольского в литературе подразумевается возникновение квазилинейчатых электронно-колебательных спектров сложных органических соединений, растворённых в специально подобранных растворителях при низких температурах [1–2]. Данное явление было обнаружено в 1952 г. Э.В. Шпольским и его сотрудниками. При нормальных условиях спектры сложных органических соединений представляют собой сплошные широкие полосы, извлечь информацию о строении молекул и их составе из таких спектров трудно или невозможно. Эффект Шпольского позволяет регистрировать спектры, состоящие из узких спектральных линий, что даёт возможность изучать их.

На базе эффекта Шпольского получила широкое практическое развитие оптическая селективная лазерная спектроскопия примесных молекул в твердых средах [3]. Сейчас оптическая спектроскопия примесных молекул в твердых растворах является востребованным инструментом, применяемым для решения задач в физике, физической химии, квантовой оптике, биофизики, оптике и спектроскопии.

В работе [4] обобщено развитие данного научного направления, включая использование узких неоднородно уширенных линий в матрицах Шпольского: методом селективного лазерного возбуждения спектров люминесценции, методом выжигания стабильных спектральных провалов и спектроскопии одиночных молекул, что позволяет устранить усреднение данных по объему исследуемого образца. Вышеперечисленные методы проявили себя в качестве эффективных инструментов для исследования твердых сред с различной степенью неупорядоченности структуры матрицы.

В работе [5] авторы предположили возможность создания активных лазерных сред основанных на основе аналогов матрицы Шпольского, и провели серию предварительных экспериментов по проверке данной гипотезы. Для этих целей была создана экспериментальная установка, позволяющая изучать люминесценцию охлажденных до криогенных температур матриц.

Основой для проведенных экспериментов послужили более ранние исследования по изучению нелинейных оптических свойств наноструктурированных матриц на основе искусственного опала SiO_2, заполненных различными жидкостями на основе органических веществ (ацетон, этанол) и охлажденных до температуры жидкого азота. В качестве образцов использовались опаловые матрицы, представляющие собой плотно упакованную трехмерную кристаллическую структуру, состоящую из наносфер (глобул) кремнезема диаметром 245, 270, 290 и 315 нм. Образцы опаловых матриц и нанокомпозитов имели размеры порядка нескольких миллиметров и были вырезаны параллельно плоскости (111). В ходе проведенных экспериментов был исследован обнаруженный ранее эффект «фотонного пламени», заключающийся в послесвечении в видимой сине-зеленой области спектра длительностью от 1 до 12 с при возбуждении замороженных матриц образцов сфокусированным излучением гигантского импульса рубинового лазера (λ = 694.3 нм, τ = 20 нс, E_{MAX} = 0.3 Дж, спектральная ширина линии генерации 0.015 $см^{-1}$). Исследование нелинейно-оптических эффектов в опаловых матрицах показало наличие таких эффектов, как эффект фотонного пламени, вынужденное глобулярное рассеяние света, вынужденное комбинационное рассеяние света. В представленной работе проанализированы условия, которые необходимы для реализации лазеров на таких матрицах.

Прежде всего, отметим, что система энергетических уровней излучающих молекул [5] соответствует трехуровневой схеме лазера, схематично представленной на рис. 1.

Такая активная среда имеет и существенное отличие от обычных лазерных сред, поскольку присутствует значительное рассеяние на длине волны лазерного перехода обусловленное принципиальной неоднородностью активной среды. Поэтому в кинетические уравнения для населенностей трехуровневой схемы необходимо добавить рассеяние, которое можно считать близким к неселективному рэлеевскому рассеянию.

Тогда система кинетических уравнений для населенностей уровней примет вид

$$
\begin{aligned}
\mathrm{dN}_3 &= \left(W_{13}N_1 - N_3/T - SN_3\right)dt,\\
\mathrm{dN}_2 &= \left(SN_3 - N_2/\tau - JB_{21}\lambda^3 N_2 + JB_{12}\lambda^3 N_1\right)dt,\\
\mathrm{dN}_1 &= \left(W_{31}N_3 + N_2/\tau + JB_{21}\lambda^3(N_2 - N_1)\right)dt,\\
\mathrm{dJ} &= \left(JB_{21}\lambda^3 N_2 - JR/\lambda^4\right)dt,\\
N_0 &= N_1 + N_2 + N_3,
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

где J – плотность потока фотонов на лазерном переходе, N – с соответствующим индексом – населенность данного уровня, W – мощность оптической накачки, B – коэффициенты Эйнштейна соответствующего перехода, S – скорость безизлучательного перехода между 3 и 2 уровнями, R – константа рэлеевского рассеяния, T и τ – времена спонтанного распада соответствующих уровней и λ – длина волны лазерного перехода. Для точного решения этой системы нелинейных дифференциальных уравнений необходимо знать сечения всех процессов.

Было проведено изучение зависимости времени люминесценции опаловой матрицы, заполненной спиртом, от температуры. Для этого мы вморозили рядом с опаловым образцом, заполненным этиловым спиртом, термопару, сопряженную с цифровым мультиметром (точность измерения температуры ± 3 К, точность определения времени люминесценции около 2 с). После заморозки образца опаловой матрицы до криогенной температуры образец помещался на металлический массивный теплоотвод, также охлажденный жидким азотом до 77 К. Затем образцу позволяли постепенно нагреваться. Оценка времени люминесценции послесвечения проводилась на основании записи эффекта цифровой камерой с экспозицией кадров 2 с. Облучение образца излучением YAG:$Nd3^+$ проводилось в течение 30 с. Результаты таких измерений в области температур от 77 до 165 К приведены на рис. 2.

В дальнейшем планируется определить и другие константы для решения системы уравнений (1). Но и сейчас можно предположить, что для реализации генерации предпочтительны среды, излучающие в красной и близкой инфракрасной областях спектра. Это предопределено тем, что коэффициент усиления среды пропорционален кубу длины волны, а потери обратно пропорциональны четверной степени длины волны. Пока же были исследованы среды, которые излучали в видимом и синем диапазонах.

В любом случае для создания лазера необходимы прямые эксперименты, и они будут продолжены.



Рис. 1. Упрощенная схема уровней эффекта Шпольского

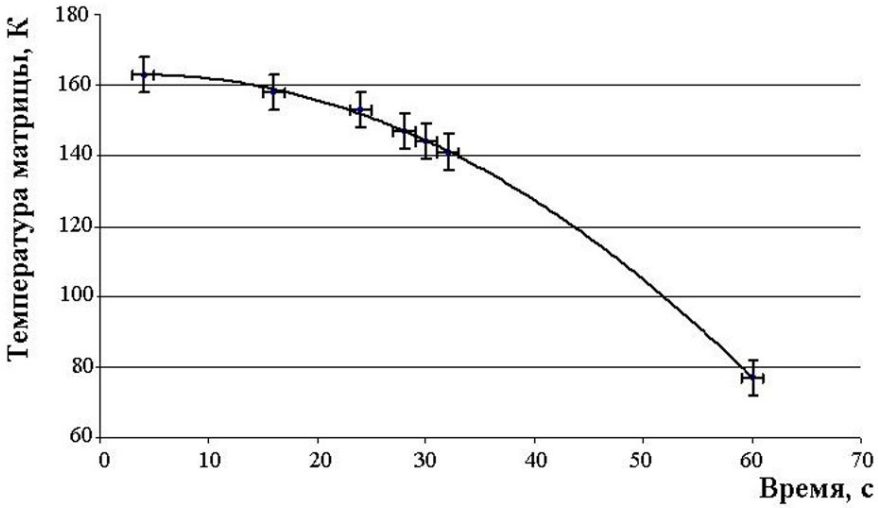


Рис. 2. Зависимость времени люминесценции образца опаловой матрицы, заполненной этиловым спиртом, от температуры

Литература

1. *Шпольский Э.В., Ильина А.А.,' Климова Л.А.* Спектры флуоресценции коронена в замороженных растворах.// ДАН СССР. 1952. Т. 87. **6**. С. 935–938.
2. *Shpol'skii E.V.* //Sov.Phys.Usp. 1961. 5. 522.
3. *Шпольский Э.В.* Проблемы происхождения и структуры квазилинейчатых спектров органических соединений при низких температурах //УФН. 1962. Т. 77. Р. 2. С. 321–336.
4. *Наумов А.В.* Спектроскопия органических молекул в твердых матрицах при низких температурах: от эффекта Шпольского к лазерной люминесцентной спектроскопии всех эффективно излучающих одиночных молекул // УФН. 2013. Т. 183. № 6. С. 633–652.
5. *Orrit M, Bernard J, Personov R. I.* High-resolution spectroscopy of organic molecules in solids: from fluorescence line narrowing and hole burning to single molecule spectroscopy //J. Phys. Chem. 1993. V. 97. P 10256.
6. *Воропинов А.В., Ципенюк Д.Ю.* Активные лазерные среды на основе эффекта Шпольского // Лазеры в науке, технике медицине: сборник научных трудов. Том 29 / под ред. В.А. Петрова М.: МНТОРЭС им. А.С. Попова, 2018. С. 93–96.

УДК 53.06

Исследование влияния ультразвука при осаждении миоглобина из водных растворов на ГКР-активные подложки

***И.А. Рыжиков*[1], *М.В. Седова*[1], *И.А. Богинская*[1], *К.Н. Афанасьев*[1], *Н.Д. Ушаков*[2], *А.Д. Аверьянова*[2], *Б.Д. Тонанайский*[2]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[2] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Для детектирования спектров комбинационного рассеяния растворов белков низких концентраций (менее 10 мкг/мл) необходимо провести пробоподготовку на специальных металлических подложках с наноструктурированной поверхностью, не разрушающую структуру исследуемого объекта и не превышающую отведенного на анализ времени. Выполнение этих условий необходимо для внедрения технологии в массовое использование. Метод ультразвуковой пробоподготовки в резонансном режиме позволит сократить время пробоподготовки раствора белка.

В эксперименте использовали специально созданный стенд для ультразвуковой подготовки, состоящий из генератора, подложкодержателя, пьезоэлементов с различными резонансными частотами (690 кГц, 880кГц, 90кГц, 1,7МГц), системы воздушного охлаждения, термопары. Водный раствор миоглобина объемом 3 мкл с концентрацией белка 10 мкг/мл наносили микродозатором

переменного объема Eppendorf на подложки с наноструктурированной поверхностью на основе серебра. Толщина рабочего слоя серебра составляла 100 нм. Подложки были получены методом электронно-лучевого испарения в вакууме с предварительным травлением стеклянной основы в плавиковой кислоте с массовой концентрацией 36%.

Анализ спектров высушенного образца миоглобина проводили с помощью спектрометра комбинационного рассеяния на основе конфокального микроскопа WITec на длине волны возбуждения 785 нм.

Спектры комбинационного рассеяния высушенного белка сравнивали со спектрами контроля (высушенный на воздухе раствор миоглобина на аналогичных подложках). Использование ультразвука позволило сократить время пробоподготовки до десяти раз. Были обнаружены эффекты конформации, отражающиеся в изменении спектра в сравнении с контрольными образцами. Также обнаружено влияние ультразвука на характер кристаллизации белка с помощью метода атомно-силовой микроскопии.

Проведенные эксперименты показали, что созданный ультразвуковой стенд в перспективе позволит осуществлять пробоподготовку растворов белка с сокращением времени высушивания без повреждения пробы и получать спектры комбинационного рассеяния белков с высокой амплитудой.

УДК 535.8

Влияние нелинейных эффектов на работу фазочувствительного рефлектометра в различных волокнах

И.А. Чурилин[1,3]***, Д.Р. Харасов***[1,2]***, Э.А Фомиряков***[1,4]***, С.П. Никитин***[1]***, О.Е. Наний***[1,4]

[1]ООО «Т8»
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[4]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В настоящее время когерентные рефлектометры [1, 2] широко используются в качестве распределенных датчиков для мониторинга вибрационного и акустического воздействия. Дальность таких датчиков ограничивается, с одной стороны, затуханием света в волокне, с другой – возникновением нелинейных эффектов при достаточно больших мощностях зондирующего импульса. В данной работе было исследовано влияние эффекта вынужденного комбинационного рассеяния на работу когерентного рефлектометра.

Исследование проводилось для трёх типов волокон: SMF, NZDSF и RDF. В качестве источника излучения использовался узкополосный лазер (ширина линии < 2 кГц). Акустооптическим модулятором формировались прямоугольные импульсы длительностью 200 нс и с частотой повторения 1 кГц. Импульсы усиливались эрбиевым усилителем (EDFA). Шум в виде спонтанного излучения (ASE) отсекался узкополосным фильтром (ширина пропускания < 0,1 нм). Перед входом в волокно устанавливался сплиттер, с помощью которого высокоскоростным фотодиодом и осциллографом измерялась мощность зондирующего импульса. Циркулятор разделяет зондирующий импульс и свет, рассеянный в обратном направлении. Обратно-рассеянный свет регистрируется фотоприемником, подключенным к аналого-цифровому преобразователю и вычислительному модулю. Спектрограмма зондирующих импульсов на выходе линии измеряется оптическим спектроанализатором ANDO AQ6317B с минимальным разрешением 0,01 нм.

Выходные спектры на длинах волн 1545–1690 нм для сигналов в трех различных типах волокон при разных входных мощностях представлены на рис. 1. Здесь мы можем наблюдать эволюцию стоксовой компоненты в зависимости от входной мощности, что говорит о развитии эффекта вынужденного комбинационного рассеяния (SRS). Входной импульс является импульсом накачки для стоксовой компоненты, которая имеет широкий спектральный диапазон 1640–1680 нм. Также в волокнах с положительной дисперсией при мощности 100 мВт начинает развиваться эффект модуляционной неустойчивости (MI), в силу прямоугольности зондирующих импульсов эффект фазовой самомодуляции (SFM) оказывает несущественное влияние на импульс, а эффект бриллюэновского рассеяния для импульсов длительностью 200 нс начинает развиваться при мощностях существенно больших, чем рассматриваются в эксперименте. Таким образом, на работу

рефлектометра с RDF-волокном оказывает существенное влияние только эффект вынужденного комбинационного рассеяния (SRS) [3–6].

Рефлектограммы в трех разных типах волокон при различных мощностях представлены на рис. 2. В первой колонке показаны рефлектограммы с мощностями входных импульсов, недостаточными для развития нелинейных эффектов. Была построена прямая после усреднения рефлектограммы в окне 1 км, коэффициент наклона которой составляет 0,4 дБ/км, что соответствует двойному параметру затухания в волокне. Во второй и третьей колонках показано влияние нелинейных эффектов на рефлектограммы: они спадают более резко, и их размах снижается после существенно меньшей дистанции.

На рис. 3 продемонстрированы усредненные интенсивности на определенных дистанциях вдоль волокна, отмеченных сверху, в зависимости от мощности входного импульса. Для кривых, соответствующих дистанциям 25, 35 и 45 км, проведена аппроксимация убывающих участков и вычислены коэффициенты наклона –16,0 ± 0,6 и –16,1 ± 0,5 дБ/Вт для SMF и NZDSF соответственно, а для RDF –14,5 ± 0,5 дБ/Вт.

Таким образом, было исследовано влияние SRS и MI на работу когерентного рефлектометра с различными типами волокна. Мощность зондового импульса в рефлектометре с RDF-волокном ограничена SRS, предельная мощность 1,0–1,1 Вт, что на 3,8 дБ выше мощности, при которой наблюдается MI для импульсов длительностью 200 нс в SMF волокнах. Оценивая затухание в волокне ~0,2 дБ/км, этот выигрыш в мощности позволяет увеличить протяженность рефлектометра на 9,5 км.

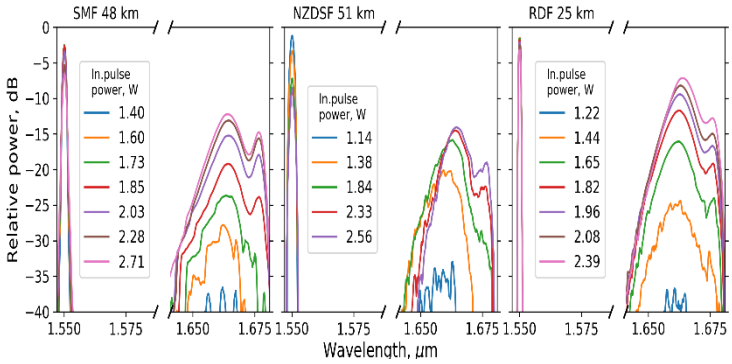


Рис. 1. Спектрограмма выходного сигнала на диапазоне 1545–1690 нм для разных типов волокон при различной входной мощности. Разрешение 1 нм

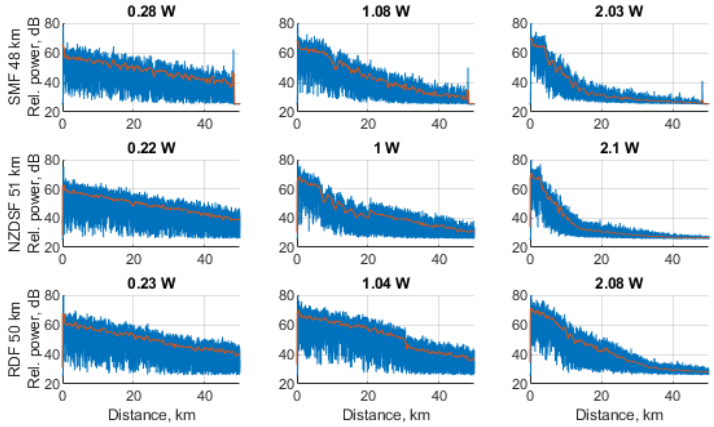
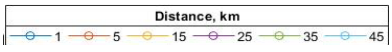


Рис. 2. Рефлектограммы (синий) от разных волокон SMF, NZDSF, RDF при различных мощностях входных импульсов. Оранжевым обозначена линия усреднения в окне 1 км



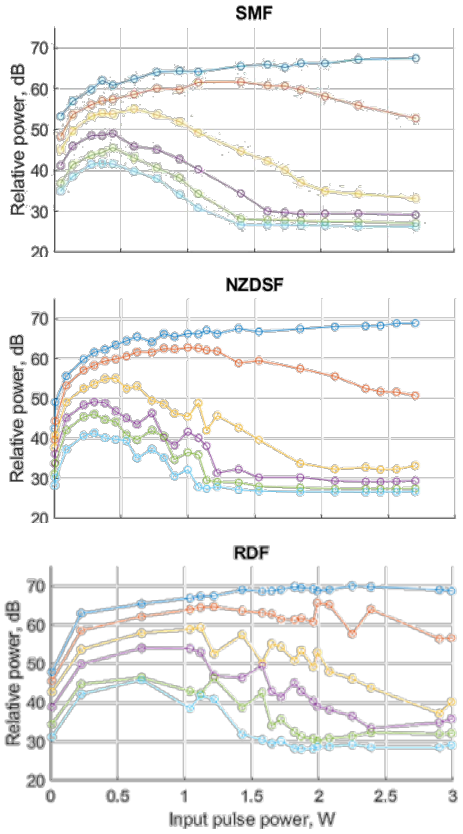


Рис. 3. Зависимость в окне усреднения 2 км рефлектограмм на различных дальностях от мощности зондового импульса

Литература:

1. *Shatalin S.V., Treshikov V.N. and Rogers A.J.*, Interferometric optical time-domain reflectometry for distributed optical-fiber sensing // Appl. Opt. 1998. Vol. 37. N 24. P. 5600–5604.
2. *Nanii O.E., Nikitin S.P., Treshchikov V.N., Manakov A.V., and Simikin D.E.*, Distributed sensor of acoustic and vibration action - RU2562689C1, 2014.
3. *Nikitin S.P., Ulanovskiy P.I., Kuzmenkov A.I., Nanii O.E., and Treshchikov V.N.*, Influence of modulation instability on the operation of phase-sensitive optical time domain reflectometers // Laser Phys. 2016. Vol. 26. N 10. P. 105106.
4. *Babin S.A., Ismagulov A.E., Podivilov E.V., Fedoruk M.P., Shelemba I.S., and Shtyrina O.V.*, Modulation instability at propagation of narrowband 100-ns pulses in optical fibers of various types // Laser Phys. Feb. 2010. Vol. 20. N 2. P. 334–340.
5. *Izumita H., Koyamada Y., Furukawa S.I., and Sankawa I.*, The Performance Limit of Coherent OTDR Enhanced with Optical Fiber Amplifiers Due to Optical Nonlinear Phenomena // Journal of Lightwave Technology. 1994. Vol. 12. N 7. P. 1230–1238.
6. *Agrawal G.*, Nonlinear Fiber Optics // New York. 2001. P. 467.

УДК 53.05

Исследование свойств метаповерхностей

Б.В. Гойхман, Н.Д. Чадромцев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Метаповерхности – материалы, линейные размеры составных частей которых сопоставимы с длиной волны исследуемого электромагнитного излучения. Ячейки метаповерхности – метаатомы – могут взаимодействовать с падающим излучением различными способами. Развитие метаповерхностей может способствовать созданию сверхтонких оптических систем.

Цель нашей работы – создание метаповерхности и изучение ее свойств. Для исследования взаимодействия электромагнитных волн и метаатомов был использован излучатель, работающий в

диапазоне 25–37 ГГц. Использовались две модели метаатомов: металлические стержни и кюветы с различными жидкостями.

Зная материал и длину стержня, полагая площадь его сечения постоянной мы получали частоту поляризации стержня, при которой наступает резонанс с последующим переизлучением.

Зная материал и длину стержня, полагая площадь его сечения постоянной, можно вычислить частоту его поляризации. Варьируя длины метаатомов, достигается резонанс с излучаемой электромагнитной волной.

УДК 53.082.64

Применение болометра на эффекте электронного разогрева с планарной антенной в спектроскопии среднего инфракрасного диапазона

***С. Малашевич*[1], *О. Бендеров*[1], *Ю. Лобанов*[2], *М. Щербатенко*[2], *А.В.Родин*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Московский педагогический государственный университет

Исследована возможность применения болометра на основе сверхрповодниковых наноструктур (hot electron bolometer, HEB) в качестве высокочувствительного широкополосного приемника инфракрасного излучения, в частности, в качестве смесителя для регистрации инфракрасного излучения в гетеродинном режиме с полосой преобразования до 3,5 ГГц. Болометр представляет собой сверхпроводящий наномостик из тонкой пленки NbN, расположенный в фидере золотой планарной спиральной антенны, оптимизированной для работы на длине волны 10 мкм [1]. Быстрый отклик и высокая чувствительность сверхпроводникового болометра определяют перспективность его использования как в прямом, так и в гетеродинном режиме детектирования. В зависимости от амплитуды сигнала на промежуточной частоте, образуемого в результате смешения исследуемого сигнала с излучением гетеродина, в качестве которого выступает стабилизированный квантово-каскадный лазер, происходит модуляция сопротивления болометра, что, в свою очередь, вызывает модуляцию сигнала на выходе детектора. Первый эксперимент в режиме гетеродинного детектирования для среднего инфракрасного диапазона был проведен для болометра без планарной антенны, имеющего размеры чувствительного сверхпроводящего участка около 20 мкм [2].

При работе в болометрическом (прямом) режиме детектирования оптическое излучение, попадая на болометр, поглощается электронной подсистемой сверхпроводниковой пленки, разрушая куперовские пары, отвечающие за сверхпроводимость, в результате чего меняется сопротивление образца. Приложенное постоянное смещение позволяет фиксировать изменение сопротивления образца. Для эффективной фокусировки падающего излучения HEB был отцентрирован и зафиксирован на плоской поверхности, вытянутой полусферической короткофокусной линзы диаметром 4 мм, совпадающей с ее фокальной плоскостью. Для согласования размеров площадки антенны с размерами фокального пятна использовалось установленное снаружи криостата внеосевое параболическое зеркало.

Были экспериментально измерены диаграммы направленности и значения эффективности квазиоптической системы, состоящей из болометра с линзой, для длин волн 7,8 и 10,4 мкм. Эффективность поглощения болометра была оценена с использованием метода изотерм [3].

Литература

1. *Shcherbatenko M., Lobanov Y., Benderov O., Shurakov A., Ignatov A., Titova N., Finkel M., Maslennikov S. , Kaurova N., Voronov B.M., Rodin A.R., Klapwijk T.M., and Gol'tsman G.N* Antenna-Coupled 30 THz Hot Electron Bolometer Mixers, 26th International symposium on space terahertz technology, Cambridge, MA, 16-18 March, 2015, P. 27.
2. *Maslennikov S.N., Finkel M.I., Antipov S.V., Polyakov S.L., Zhang W., Ozhegov R., Vachtomin Yu.B., Svechnikov S.I., Smirnov K.V., Korotetskaya Yu.R., Kaurova N.S., Voronov B.M., and Gol'tsman G.N.* Spiral antenna coupled and directly coupled NbN HEB mixers in the frequency range from 1 to 70 THz, 17th International Symposium on Space Terahertz Technology, TH3-I, 2006.
3. *P. Khosropanah, W. Zhang, E.L. Kollberg, K.S. Yngvesson, J.R. Gao, T. Bansal, and M. Hajenius,* Analysis of NbN Hot Electron Bolometer Receiver Noise Temperatures above 2 THz with a Quantum Noise Model, IEEE Transactions on Applied Superconductivity 19. N 3. 2009 Part. 1. P. 274–277.

УДК 519.213.1; 623.401

Методика оценки динамики зрительной деятельности человека

А.И. Миланич, Б.М. Маркеев, А.Н. Труфанов, В.Б. Маркеев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Обратимся к теории цветного зрения Юнга–Гельмгольца [1], согласно которой существует три типа цветовых фотоприемников на сетчатке (рис. 1), работающих на стандартных физических принципах (обратимая фотохимическая реакция разложения йодопсина под воздействием света). Задача Коши в случае динамики явлений переноса обычного йодопсина с концентрацией N и модифицированного с концентрацией N_T принимает вид

$$\nabla_t N = -(k_1 + k_T + k_2 \cdot \cos\omega_0 t) \cdot N + k_T,$$
$$N + N_T = 1, \qquad (1)$$
$$t = 0 : N = N(0).$$

Здесь $k_1 = kc^{(1)}$, $k_2 = kc^{(2)}$, $k_1 >> k_2$, k – константа скорости уменьшения концентрации йодопсина за счет фотонов света, k_T – константа скорости увеличения йодопсина за счет процессов перехода модифицированного йодопсина в обычный йодопсин. В связи с тем, что в исходном уравнении (1) в правой части присутствует осциллирующее слагаемое с $\cos\omega_0 t$, представим его решение в виде ряда Хилла [2]:

$$(N(t) = (N_{(н)}^{(0)} + N_{(о)}^{(0)} \exp(-\frac{t}{\tau}) + (N_{(н)}^{(1)} + N_{(о)}^{(1)} \exp(-\frac{t}{\tau})) \exp(-i\omega_0 t) +$$
$$+(N_{(н)}^{(-1)} + N_{(о)}^{(-1)} \exp(-\frac{t}{\tau}) \exp(i\omega_0 t);$$
$$\tau = (kc^{(1)} + k_T)^{-1}.$$

Здесь частное решение неоднородного уравнения (1) определяется соотношениями

$$N_{(н)}^{(0)} = k_T \tau [J_0^2(a) - J_1^2(a) 2 / (1 + \tau^2 \omega_0^2)],$$
$$a = -ik_2 / \omega_0,$$
$$N_{(н)}^{(\pm 1)} = \pm k_T \tau J_0(a) J_1(a)(2 \mp i\omega_0 \tau) / (1 \mp i\omega_0 \tau).$$

Обратимся к однородному решению (1)
$N_{(о)}^{(0)} = N(0) - N_{(н)}^{(0)}; N_{(о)}^{(\pm 1)} = \pm N_{(о)}^{(0)} J_1(a) / J_0(a),$,тогда решение задачи Коши (1) можно представить в следующем виде:

$$N(t) = N(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + k_T \tau \left\{\left[1 + \left(\frac{k_2}{\omega_0}\right)^2 \left(\frac{3}{8}\right)\right] \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right) - \left(\frac{k_2}{\omega_0}\right) \sin\omega_0 t\right\}.$$

Используя данные зависимости, получим при больших временах в рамках обратной задачи выражения

$$kc^{(1)} = (\omega_0 c^{(1)} / c^{(2)}) \cdot [(8/3)(N_1 - N_0) / N_0]^{1/2},$$
$$k_T = kc^{(1)} N_0 / (1 - N_0),$$

определяющие константы к убыли йодопсина под воздействием внешнего излучения и k_T роста йодопсина при его ослаблении в модели (1) по известным заселенностям в стационарном N_0 и переменном N_1 режимах.

В заключение отметим, что предложенная оценка динамики зрительной деятельности человека основывается на анализе поведения зрительных пигментов сетчатки, участвующих в механизме зрения. По результатам анализа получены характерные постоянные динамики

пигментов: k – убыли йодопсина и k_T – его роста по заселенностям в стационарном N_0 и переменном N_1 режимах.

Литература

1. *Helmholtz H.* Handbuch physiol. Optik, Bd. 3. Hamburg, 1911.
2. *Никифоров А.Ф.* Справочник по специальным функциям // пер. с англ. М., 1979.

УДК 530.19, 535.14

Расчет квазиклассических параметров фотона

А.И. Миланич

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

Как известно, фотон является одной из базовых частиц квантовой механики и релятивистской физики, хотя он до сих пор не имеет приемлемого объяснения ряда присущих ему свойств, не говоря о модели или корректных представлений о его структуре. Данная работа – это попытка предложить новый подход к расчету некоторых параметров фотона.

Начнем с ряда противоречий, на которые обычно обращают недостаточно внимания. В квантовой механике энергия фотона *E* равна энергии строго монохроматической волны с частотой ω:

$$E = \hbar\omega, \tag{1}$$

где $\hbar$ – постоянная Планка.

Из соотношения (1) следует, что фотон – это бесконечная волна в пространстве и времени, что противоречит принципу неопределенности Гейзенберга и экспериментальному факту, что фотоны всегда имеют конечное время жизни.

Иные проблемы возникают при волновом описании фотона, как электромагнитной волны (следствие решения уравнений Максвелла). Поскольку для стоячей электромагнитной волны существуют моменты времени, когда в силу синфазности и электрическое, и магнитное поля одновременно равны нулю. В эти моменты объемная плотность энергии волны также равна нулю, поэтому энергия фотона в этот момент пропадает бесследно, а затем вдруг возникает из ниоткуда! И это далеко не все известные для фотона парадоксы.

Существуют различные способы описания движения фотона в пространстве. Например, в радиотехнике принято рассматривать движение электромагнитной волны по кабелю, как процесс движения зарядов по системе распределенных в пространстве индуктивностей и конденсаторов, как это изображено на рис. 1.

Чтобы использовать предложенный подход для описания движения фотона в пространстве, достаточно считать, что физическое пространство обладает аналогичными параметрами, а именно: распределенной индуктивностью *L* и емкостью *C*. А это значит, что физическое пространство не такое и «пустое»! Кстати, данное предположение снимает парадокс с исчезновением энергии стоячей электромагнитной волны – исчезнувшая энергия передается пространству, а затем возвращается из него.

Концепцию пространства как некоторой физической среды («эфира») предлагали с античных времен, но лишь начиная с Р. Декарта [1] концепция эфира рассматривается как научная гипотеза. Конечно, современные представления о свойствах физического пространства сильно изменились [2].

В рамках данной работы мы ограничимся лишь процессом распространения фотонов и попытаемся оценить (рассчитать) некоторые макроскопические параметры фотона.

Для представленной на рис. 1 схемы, можно записать волновое сопротивление *Z* кабеля и период колебаний *T* системы:

$$Z = \sqrt{\frac{L}{C}}, \tag{2}$$

$$T = 2\pi\sqrt{LC}\ . \qquad (3)$$

И здесь нас ожидают первые сюрпризы. Оказалось, что понятие волнового сопротивления вакуума существует не в каждой системе физических единиц. Если в системе СИ это сопротивление примерно равно 37б,730 Ом [3], то в системах СГС аналогичное выражение (с размерностью сопротивления) отсутствует! Конечно, это абсурд, что понятие конкретной физической величины (волнового сопротивления) зависит от выбора системы единиц!

Далее можно записать, что энергия бегущей по кабелю волны – это последовательный переход энергии, запасенной в индуктивности *L* в энергию конденсатора *C*. То есть

$$E = \hbar\omega = C\frac{u^2}{2} = L\frac{I^2}{2} = \Phi\frac{q}{2T}, \qquad (4)$$

где помимо прежних обозначений *u* – напряжение на конденсаторе, *I* – ток индуктивности, *q* – заряд, *Ф* – магнитный поток (*Ф* = *LI*) и *T* – период колебаний контура.

С учетом квантования величины магнитного потока

$$\Phi = \frac{h}{2e} \qquad (5)$$

где *h* – постоянная Планка ($2\pi\ \hbar$) и e – заряд электрона.

При условии, что *q* = *e* получим полное совпадение формул (1) и (5)

То есть можно предположить, что фотон переносит в пространстве связанную систему зарядов (диполь), движение которых и генерирует магнитные и электрические поля. Такие идеи высказывались и прежде [4], но это тоже лишь некоторая итерация, которая не может объяснить, например, дифракцию на нескольких щелях или влияние наблюдателя на результат эксперимента.

Кроме того, нельзя утверждать, что *q* = *e*, а изменению величины заряда диполя соответствует перенормировка ряда коэффициентов и величины кванта потока, который пока экспериментально проверен только для сверхпроводника. То есть вопрос о величине заряда *q* остается открытым и здесь приведена только оценка.

И все же с большой долей вероятности в пространстве движется диполь (или квадруполь), поскольку фотон не отклоняется в электрическом поле. Возможная замена заряда электрона на заряд кварка [2] приведет к незначительному изменению численных коэффициентов в некоторых формулах.

Наконец, проведем численные оценки величины токов и напряжений в пространстве, ассоциированное с движением фотона с длиной волны вблизи 600 нм.

Период колебаний *T* такого фотона составит ~ 2 10^{-15} с, сила тока *I*= *e*/*T* ~ 10^{-4} А = 100 мкА, напряжение *U* = *IR* примерно 0,037 В = 37 мВ.

Конечно, все вышесказанное требует экспериментальной проверки, но это всегда легче выполнить, когда основные «радиотехнические» параметры фотона можно рассчитать.

Кроме того, в рамках предложенной модели можно предположить, что вынужденное излучение – это сложение магнитных потоков нескольких фотонов, предложить объяснение поляризации и т.д.

Конечно, предложена очень грубая модель фотона, которая имеет право на существование, но не может объяснить дифракцию единичного фотона на нескольких щелях, явление запутанных фотонов и т.д. Но всегда с чего-то надо начинать…

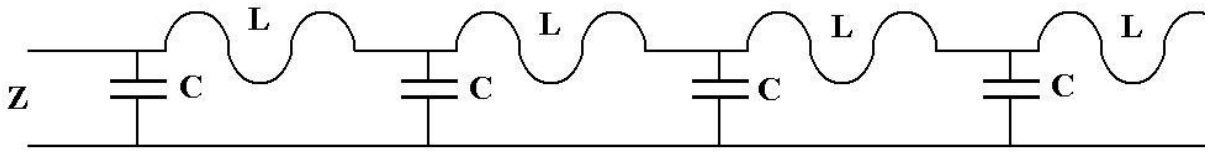


Рис. 1. Схема распространения электромагнитной волны по кабелю

Литература

1. URL = https://ru.wikipedia.org/wiki/,_Рене
2. *Миланич А.И.* Дискретная Вселенная без Большого Взрыва. М.: Изд-во ОнтоПринт, 2017. С.114. ISBN 978- 5-906886-36-1
3. URL = https://ru.wikipedia.org/wiki/Волновое_сопротивление_вакуума

4. *Леонтьевич А.Б.* Модель фотона // Научный журнал КубГАУ. 2015 № -111(07). С. 1–23.

УДК 535.92

Изучение изгибных потерь в волоконно-оптическом халькогенидном разветвителе в среднем ИК-диапазоне

***Т.С. Тебенева*[1], *О.В. Бендеров*[1], *Б.С. Степанов*[2], *И.А. Нечепуренко*[3], *А.В. Родин*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт химии высокочистых веществ РАН
[3]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

Активное развитие волоконных световодов в 80-х годах прошлого столетия способствовало достижению теоретически минимального уровня потерь в волокнах в диапазоне длин волн до 2 мкм. Создание оптических волокон из материалов, которые прозрачны в более длинноволновой инфракрасной области спектра, стало началом развития волоконной оптики в среднем ИК-диапазоне. Необходимость перехода в этот диапазон обусловлена возможностью применения волоконно-оптических устройств для задач дистанционной ИК-спектроскопии, в частности, для определения составов различных веществ, мониторинга окружающей среды, для исследований в сфере фотоники, лазерной технике, медицине и в других областях [1]. К материалам, обладающим необходимыми свойствами, можно отнести стекла на основе фторидов тяжелых металлов, поликристаллы на основе галогенидов серебра и халькогенидные стекла [2].

В работе для изготовления волоконных разветвителей использовалась технология сплавления FBT, которая подразумевает нагрев волокон с их одновременной вытяжкой в зоне сплавления при постоянном контакте волокон. В качестве материала использовались одномодовые оптические волокна, изготовленные из стекла As_2S_3 с диаметром сердцевины/оболочки 6,3/123 мкм, числовой апертурой – 0,17, и оптическими потерями ~ 400 дБ/км на длинах волн 2,1–2,2 мкм, изготовленные в ИХВВ РАН. Торцы волокон были предварительно отполированы с использованием стандартных соединителей FC/APC.

Скручивание волокон, необходимое для поддержания постоянного контакта волокон приводит к увеличению изгибов волокон во время нагрева и сплавления. Технология сплавления FBT предполагает адиабатический переход световой моды из сердцевины волокна в область вытянутого участка волокна и обратно. Математически это означает, что изменение радиуса волокна не должно превышать разницу между волновыми числами основной и оболочечной моды:

$$da / dz \le a\left(\beta_f - \beta_{cladding}\right) / 2\pi .$$

Если это условие выполняется, то основным вкладом в потери являются потери на изгибе волокна. Радиус изгиба определяется как

$$R = \left(D^2 + z_0^2 / 2\pi\right) / D ,$$

где D − расстояние между сердцевинами волокна, z_0 − радиус спирали, образованной скрученными волокнами.

Для оценки потерь использовалась формула [3]:

$$\alpha\left(\mathrm{R_{eff}}\right) = \frac{\sqrt{\pi}\kappa^2 \exp\left[-\frac{2\gamma^3 \mathrm{R_{eff}}}{3\beta_z{}^2}\right]}{4\sqrt{\mathrm{R_{eff}}}\gamma^{3/2}V^2 BesselK\left[-1,\gamma a\right] BesselK\left[1,\gamma a\right]}.$$

где $\mathrm{R_{eff}}$ − эффективный радиус изгиба, a − радиус сердцевины, $V = \frac{\omega}{c} a\sqrt{n_{core}^2 - n_{clad}^2}$ − V-параметр, β_z − проекция волнового вектора на ось симметрии волокна, $\kappa = \sqrt{k_{core}^2 - \beta_z^2}$, $\gamma = \sqrt{\beta_z^2 - k_{clad}^2}$. Результирующее значение потерь изображено на рис. 1.

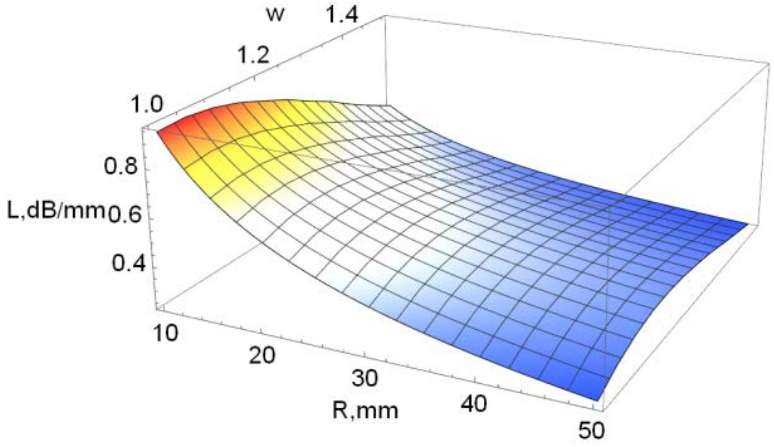


Рис. 3. Зависимость потерь от радиуса изгиба халькогенидных волокон

Литература

1. *Жукова Л.В.* [*и др.*]. Волоконные световодны для среднего инфракрасного диапазона. Екатеринбург: УМЦ УПИ, 2016. 247 с.
2. *Snopatin G.* [*et al.*]. Churbanov M. High-purity chalcogenide glasses for fiber optics, Inorganic Materials, 2009. V. 45. P. 1439.
3. *Schermer R.T., Cole J.H.* Improved bend loss formula verified for optical fiber by simulation and experiment // IEEE Journal of Quantum Electronics. 2007. V. 43. P. 899–909.

УДК 004.932.2

Поляризационное световое поле в задаче трехмерного сканирования объектов

В.А. Таамазян

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрена задача реконструкции карты нормалей к поверхности трехмерного объекта, а также определения свойств материала в каждой точке объекта с помощью анализа поляризации света, отраженного от неизвестного объекта, а также от объекта с известной формой и свойствами материала (далее – калибровочный объект).

Классический подход к Форме из Поляризации (ФиП) полагается на отраженный зеркально от объекта неполяризованный свет [1]. Однако в реальном мире крайне сложно добиться полностью неполяризованного освещения, и свет, как правило, частично поляризован, что нарушает базовую гипотезу о неполяризованном мире. В данной работе мы показываем, что подход ФиП может быть успешно использован и в отсутствие предположения о неполяризованном мире, позволяя к тому же разрешить неопределенность азимута и зенита [2], и, таким образом, получить корректную карту нормалей.

Интенсивность света, отраженного от определенной точки объекта и поступившая в пиксель матрицы камеры, пройдя предварительно через поляризатор, может быть выражена в следующем виде:

$$I\left(\phi_{pol}\right)=\frac{I_{\max}+I_{\min}}{2}+\frac{I_{\max}-I_{\min}}{2}\cos\left(2\left(\phi_{\text{pol}}-\phi\right)\right), \quad (1)$$

где ϕ – фаза поляризованного света, ϕ_{pol} – угол поляризатора, $I_{\max}$ и $I_{\min}$ – максимальная и минимальная интенсивности света [2].

Рассмотрим частично поляризованный луч света, падающий на некоторую точку объекта. Интенсивность данного луча можно разбить на следующие 2 компоненты:

$$I = I_{up} + I_p, \tag{2}$$

где I_{up} – неполяризованная компонента падающего на точку объекта светового луча, I_p – поляризованная компонента падающего на точку объекта луча. Мы можем рассмотреть отражение каждой из компонент от объекта независимо. Тогда уравнение (1) для каждой точки объекта преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} I(\phi_{pol}) = \frac{I_{up}}{2}(R_s \sin^2(\phi - \phi_{pol}) + R_p(1 - \sin^2(\phi - \phi_{pol}))) + \\ + I_p(R_p \cos^2\psi + R_s \sin^2\psi)\cos^2(\arctan(\tan\psi\sqrt{\frac{R_p}{R_s}}) + \phi - \phi_{pol}), \end{aligned} \tag{3}$$

где ϕ – угол поляризации поляризованной компоненты падающего на точку объекта луча, R_s и R_p – коэффициенты отражения материала для *s* и *p* поляризации соответственно в данной точке объекта. При вращении поляризатора и соответственно изменении ϕ_{pol} уравнение (3) задает систему, которая может быть разрешена либо для определения отражательных свойств объекта, а также ориентации нормали к данной точке объекта, либо для определения параметров падающего на объект света, а именно I_{up}, I_p, и ϕ в каждом направлении.

Таким образом, используя калибровочный объект, мы вычисляем $I_{up}(\theta,\varphi)$, $I_p(\theta,\varphi)$ и $\phi(\theta,\varphi)$ и составляем световое поле с поляризационной информацией для данной сцены. Далее, используя данное световое поле, мы решаем систему уравнений (3) для нового объекта в каждой точке и определяем как форму объекта, так и коэффициенты отражения. Заметим, что в случае достаточно неоднородного светового поля с поляризационной информацией данный метод позволяет также разрешить π-неопределенность определения азимута объекта. Вне зависимости от однородности светового поля данный метод позволяет оценить величину компоненты зенита в нормали к поверхности, так как предполагает вычисление физических свойств поверхности [2]. Численное решение системы уравнений, задаваемой уравнением (3), производится с помощью метода роя частиц ввиду большого количества локальных минимумов, зависящих также от структуры светового поля.

Литература

1. *Atkinson G.A., Hancock E.R.* Recovery of surface orientation from diffuse polarization // Image Processing, IEEE Transactions on 15(6). 2006. 1653–1664.
2. *Kadambi A., Taamazyan V, Shi B., Raskar R.*. Polarized 3D: High-quality depth sensing with polarization cues. // The IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). 2015. P. 3370–3378.

СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Председатель: Ю.М. Белоусов (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: В.П. Крайнов (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: И.В. Черноусов

Дата: 24.11.2018

Время: 12:20

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 3, ауд. 508 ГК, МФТИ

УДК 530.145, 539.1.01

Комментарии к адиабатической теореме

Д.А. Трунин

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

Рассмотрен случай $0+1$-мерной неравновесной КТП на примере квантовомеханического осциллятора с переменной частотой $\omega(t)$ и $\lambda\varphi^4$-взаимодействием. Показано, что в случае постоянной частоты петлевые поправки к келдышевскому пропагатору $D^K(T,\tau)$ инфракрасно расходятся. В то же время поправки к запаздывающему/опережающему пропагаторам $D^{R/A}(T,\tau)$ не расходятся. Здесь $T=\frac{1}{2}(t_1+t_2)$ – это среднее время двухточечной корреляционной функции, а $\tau=t_1-t_2$ – разница времен. А именно, выражения для пропагаторов имеют следующий вид:

$$
\begin{aligned}
&D_0^K(T,\tau)=\frac{1}{2}\left(f_1 f_2^* + f_1^* f_2\right)=\frac{1}{2\omega}\cos(\omega\tau),\\
&D_1^K(T,\tau)=O\left(T^0\right),\\
&D_2^K(T,\tau)=27i\frac{\lambda^2 T}{(2\omega)^5}\left(f_1^* f_2^* - f_1 f_2\right)=54\frac{\lambda^2 T}{(2\omega)^6}\sin(2\omega T)+O\left(T^0\right),\\
&D_0^R(T,\tau)=\theta(\tau)\left(f_1 f_2^* - f_1^* f_2\right)=\theta(\tau)\frac{i}{\omega}\sin(\omega\tau),\\
&D_1^R(T,\tau)=D_2^R(T,\tau)=O\left(T^0\right).
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

Здесь f_1, f_2 – это значения мод в моменты времени t_1, t_2. Расчет выполнен двумя способами: разложением оператора эволюции по степеням λ и с помощью диаграммной техники Швингера–Келдыша [1, 2]. Стоит отметить, что последний способ позволяет получить значения корреляционных функций только для основного состояния теории, поскольку в квантовой механике теорема Вика работает только при усреднении по основному или тепловому состоянию [3].

Тем не менее возникающие расходимости можно убрать, «поворачивая» вакуумное состояние свободной теории; другими словами, можно добиться, чтобы $D_n^K(T,\tau)=O\left(T^0\right)$ для

всех n. Кроме того, келдышевский пропагатор можно связать с заселенностью уровней $n = \langle a^\dagger a \rangle$ и аномальным квантовым средним $\kappa = \langle aa \rangle$, где $a, a^\dagger$ – это лестничные операторы:

$$D^K(T,\tau) = \left(n(T) + \frac{1}{2} \right) f_1 f_2^* + \kappa(T) f_1 f_2 + h.c. \tag{2}$$

Таким образом, в случае постоянной частоты заселенность уровней и аномальное квантовое среднее не растут со временем; такого поведения следовало ожидать, поскольку система не может взаимодействовать с внешним миром, а ее энергия остается постоянной.

В случае адиабатически изменяющейся частоты выражения для келдышевского и запаздывающего/опережающего пропагаторов расходятся так же, как в случае постоянной частоты (1), и от этих расходимостей можно избавиться с помощью аналогичной процедуры. Таким образом, случаи постоянной и адиабатически изменяющейся частоты качественно не отличаются друг от друга. Этот факт связан с адиабатической теоремой [4] из квантовой механики, которая утверждает, что адиабатическое взаимодействие не изменяет собственное состояние гамильтониана, если оно отделено энергетической щелью от остального спектра.

С другой стороны, в случае не адиабатически изменяющейся частоты поправки к келдышевскому пропагатору расходятся сильнее, причем от этого роста нельзя избавиться модификацией вакуумного состояния или перенормировкой частоты:

$$\begin{aligned}
&D_0^K(T,\tau) = \frac{1}{2}(f_1 f_1^* + f_1^* f_2), \\
&D_1^K(T,\tau) = -9i \frac{\lambda T}{(2\omega)^2} \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 \right) \left(\alpha^* \beta^* f_1 f_2 - \alpha\beta f_1^* f_2^* \right) + O(T^0), \\
&D_2^K(T,\tau) \simeq \frac{(\lambda T)^2}{(2\omega)^2} \left[|\alpha|^2 |\beta|^2 (f_1 f_2^* + f_1^* f_2) - \frac{1}{2} \left(|\alpha|^2 + |\beta|^2 \right) \left(\alpha\beta f_1^* f_2^* + \alpha\beta f_1 f_2 \right) \right] + O(T), \\
&D_0^R(T,\tau) \sim D_1^R(T,\tau) = O(T^0), \\
&D_2^R(T,\tau) = O(T).
\end{aligned} \tag{3}$$

Это указывает на секулярный рост заселенности уровней и аномального квантового среднего, связанный с закачкой энергии в систему. При этом теория возмущений перестает работать, поскольку даже при малых λ произведение $\lambda T \sim 1$.

Таким образом, на примере простой системы установлено, при каких условиях квазиклассическое (древесное) приближение можно применять для расчета корреляторов и заселенности уровней – понимание этих условий важно для многих приложений, в частности, для исследования коллапса черной дыры [5, 6], космологической инфляции [7] или рождения частиц в сильных электрических полях [8].

Литература

1. *Schwinger J.* Brownian Motion of a Quantum Oscillator // Journal of Mathematical Physics. 1961. 2. 407.
2. *Keldysh L.V.* Diagram technique for nonequilibrium processes // Sov. Phys. JETP. 1965. 20. 1018.
3. *Evans T. S.* and *Steer D. A.* Wick's theorem at nite temperature // Nucl. Phys. B. 1996. 474. 481.
4. *Born M.* and *Fock V. A.* Beweis des Adiabatensatzes // Zeitschrift für Physik A. 1928. 51. (3-4). 165.
5. *Unruh W. G.* Notes on black-hole evaporation // Phys. Rev. D. 1976. 14. 870.
6. *Akhmedov E.T., Godazgar H. and Popov F.K.* Hawking radiation and secularly growing loop corrections // Phys. Rev. D. 2016. 93. N 2. 024029.
7. *Giddings S. B.* and *Sloth M. S.* Cosmological diagrammatic rules // JCAP. 2010. 1007. 015.
8. *Akhmedov E.T., Astrakhantsev N. and Popov F.K.* Secularly growing loop corrections in strong electric fields // JHEP. 2014. 1409. 071.

УДК 53

Локальные симметрии NS 5-бран и Т-дуальность

***Д.А.Рудинский*[1], *Э.Т.Мусаев*[2]**

[1]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)

Понятие симметрии является центральным в современных физических теориях и позволяет изучать динамику в режимах, недоступных для стандартной теории возмущений. В моделях компактификаций теории струн наблюдается особый класс симметрий, называемых Т-дуальностями, которые нельзя сформулировать для теорий точечных частиц. Поскольку струны являются одномерными объектами, замкнутые струны могут наматываться на нетривиальные циклы компактного пространства, и для описания состояний струны необходимо учитывать не только моды импульса, но и моды намоток. Симметрия относительно Т-дуальности вдоль одномерного тора состоит в том, что массовый спектр возбуждений на такой струне не меняется, при одновременной замене числа мод импульса на число мод намоток и изменении радиуса цикла R на обратный ему:

$$p \leftrightarrow w, R \leftrightarrow \frac{a'}{R}. \qquad (1)$$

Для n-мерного тора преобразования Т-дуальности даются правилами Бушера, которые перемешивают метрический тензор $G_{\mu\nu}$ и калибровочное поле $B_{\mu\nu}$, переводя обычные многообразия в более общие геометрические объекты, называемые Т-образиями (T-fold). В отличие от обычных римановых многообразий, Т-образия глобально определяются только с точностью до преобразования Т-дуальности. Так, преобразования Т-дуальности переводят магнитный партнер фундаментальной струны, NS5-брану, в гравитационный монополь, т. н. KK5-брану, а потом в экзотические браны. Удобно изображать следующую орбиту Т-дуальности

$$NS5 \leftrightarrow KK5 \leftrightarrow Q5 \leftrightarrow R5, \qquad (2)$$

где экзотические браны Q5, R5 получаются из NS5-браны преобразованиями Т-дуальности. Геометрия пространства-времени вокруг экзотических бран описывается в терминах геометрии Т-образий. [1]

Несмотря на название, экзотические браны являются такими же фундаментальными объектами, как D-браны или сама струна. В последнюю декаду экзотические браны и Т-образия приковывают к себе все больше внимания в связи с феноменологическими приложениями, в основном в задачах компактификации. Самым простым примером компактного пространства является шестимерный тор, однако такие модели страдают от наличия безмассовых скалярных полей, большого числа суперсимметрий и отсутствия неабелевых калибровочных бозонов. Задача генерирования масс для скалярных полей и построения инфляционного потенциала в таких моделях называется проблемой стабилизации модулей [2].

В моделях флакс-компактификаций проблему стабилизации модулей предлагается решать при помощи потоков калибровочных полей на компактном пространстве и ненулевой кривизны и кручения этого пространства. Например, интегральный поток тензора напряженности для NS5-браны дает массы скалярным полям, отвечающим модулям комплексной структуры [3]:

$$\int_S H_{mnk} dS^{mnk} \propto m = \text{const}. \qquad (3)$$

Более пристальное изучение таких моделей показывает, что для полной стабилизации модулей необходимо включать также потоки, генерируемые экзотическими бранами [4].

В данной работе изучаются свойства экзотических бран, а именно локальные симметрии конфигураций пространства–времени и калибровочных полей вокруг них. Исследование ведется в формализме двойной теории поля в которой струнные симметрии делаются явными за счет удвоения числа пространственных координат. При этом струнные моды импульса соответствуют обычным пространственным координатам в смысле преобразования Фурье, а моды намотки соответствуют новым дуальным негеометрическим координатам. На таком пространстве определяется структура обобщенной геометрии, для которой в настоящее время известны понятия обобщенной производной Ли, обобщенного тензора кривизны и кручения.

Данная работа в основном опирается на результаты статьей [5, 6], в которых было показано, что орбита Т-дуальности, включающая NS5-брану, KK5-монополь и экзотические браны

Q5, R5, описывается единым решением уравнений двойной теории поля, называемым DFT-монополь. В зависимости от проекции удвоенного пространства на физическое пространство конфигурация DFT-монополя переходит в известные конфигурации обычных и экзотических бран. В работе были найдены обобщенные вектора Киллинга для DFT-монополя:

$$\Xi^M = (\xi^m, \lambda_m), \tag{4}$$

которые являются инвариантными относительно T-дуальности. Показано, что в зависимости от выбора проекции компоненты ξ^m и λ_m обобщенного вектора Киллинга могут быть интерпретированы как обычные вектора Киллинга и симметрии относительно калибровочных преобразований B-поля:

$$L_\xi G_{mn} = 0, \tag{5}$$

$$L_\xi B_{mn} + 2\partial_{[m}\lambda_{n]} = 0. \tag{6}$$

Для найденных обобщенных векторов Киллинга была построена алгебра относительно скобки, определенной обобщенной производной Ли:

$$[\Xi_{(a)}, \Xi_{(b)}]^M = F_{ab}{}^c \Xi_c^M, \tag{7}$$

где индексы *a, b, c* нумеруют вектора Киллинга, а F_{ab}^c совпадает с интегральным потоком калибровочного поля H_{mnk}, либо с его T-дуальными партнерами.

Полученный результат показывает связь геометрических характеристик конфигураций полей для экзотических бран в двойной теории поля и алгебраических свойств соответствующих векторов Киллинга. Дальнейшим развитием данной работы будет поиск спиноров Киллинга, которые соответствуют ненарушенным суперсимметриям рассматриваемых решений. Биспинорные соотношения между спинорами Киллинга и векторами Киллинга позволит получить связь между геометрическими характеристиками пространства и его BPS свойствами. В качестве одного из возможного применения полученных результатов является поднятие известных решений низкоразмерных расширенных супергравитаций в полную десятимерную теорию, зная интегральные потоки, ассоциированные с такими решениями.

Литература

1. *Hull C.M.* Global aspects of T-duality, gauged sigma models and T-folds // *JHEP*. 2007. Vol. 0710. P. 057
2. *Grana M.* Flux compactifications and generalized geometries // *Class.Quant.Grav*. 2006. Vol. 23. P. S883–S926
3. *Louis Jan, Micu Andrei*. Type 2 theories compactified on Calabi-Yau threefolds in the presence of background fluxes // *Nucl. Phys.* 2002. Vol. B635. P. 395–431.
4. *Hassler Falk, Lust Dieter, Massai Stefano*. On Inflation and de Sitter in Non-Geometric String Backgrounds. 2014.
5. *Berman David S., Rudolph Felix J.* Branes are Waves and Monopoles // *JHEP*. 2015. Vol. 05. P. 015.
6. *Bakhmatov Ilya, Kleinschmidt Axel, Musaev Edvard T.* Non-geometric branes are DFT monopoles // *JHEP*. 2016. Vol. 10. P. 076.

УДК 538.9

Перепутанные состояния в одномерной и двумерной модели Кугеля-Хомского

В.Э. Валиулин[1,2,3]***, А.В. Михеенков***[1,2,3]***, К.И. Кугель***[4,5]***, А.Ф. Барабанов***[1]

[1]Институт физики высоких давлений им. Л.Ф.Верещагина РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[4]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[5]Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики

В системах с сильно коррелированными электронами, таких как соединения переходных металлов, тесная взаимосвязь спиновых, орбитальных и зарядовых степеней свободы приводит к необычайному разнообразию фазовых диаграмм и ко многим необычным явлениям, например, к колоссальному магнитосопротивлению. В недопированных соединениях магнетизм обусловлен сверхобменным взаимодействием, приводящим к гамильтониану типа Гейзенберга. В системах с

орбитальным вырождением магнетизм обычно описывается спин-орбитальными моделями, в которых спиновое взаимодействие гейзенберговского типа дополняется взаимодействием между орбиталями, а также взаимодействием этих подсистем. Таким образом, орбитали определяют взаимодействие между спинами и наоборот. Однако обменный механизм взаимодействия орбиталей сосуществует и с решеточным (ян-теллеровским) механизмом. При заданном заполнении орбиталей величина и знак обменного взаимодействия задаются правилами Гудинафа-Канамори-Андерсона. Такая спин-орбитальная физика может интерпретироваться как обобщение модели Гейзенберга, где обменные интегралы сами являются операторами, зависящими от орбитальных степеней свободы. В результате и спиновое, и орбитальное взаимодействие может быть, как ферро-, так и антиферромагнитного типа. При этом обменное взаимодействие оказывается сильно фрустрированным даже на квадратной и кубической решетках, что усиливает квантовые эффекты в таких системах. Таким образом, спины и орбитали формируют «запутанное» квантовое состояние, которое вызывает в последнее время значительный интерес. Эта проблема будет рассмотрена на примере симметричной спин-орбитальной модели на линейной и квадратной решетках, воспользовавшись сферически-симметричным самосогласованным подходом, дающим надежные результаты для низкоразмерных спиновых систем.

Модель изучается в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода для двухвременных запаздывающих спиновых функций Грина (СССП). Метод (см. [1]) сводится к замыканию цепочки уравнений для функций Грина на втором шаге с выделением спин-спиновых корреляторов. Подход автоматически сохраняет SU(2) симметрию гамильтониана, трансляционную симметрию и спиновый констрейнт на узле. При ненулевой температуре в СССП также автоматически соблюдается теорема Мермина-Вагнера.

Рассматривается случай антиферромагнитного взаимодействия внутри каждой из подсистем и отрицательного межподсистемного обмена. Из трех возможных способов выделения в среднеполевом представлении ненулевых парных средних оставлен только случай выделения среднего ⟨SiTig⟩ (детальное обсуждение использованного приближения см. в [1]). Стоит отметить, что получаемая таким образом модель имеет и иной физический смысл, она отвечает в 2D двум взаимодействующим плоскостям, а в 1D – двум взаимодействующим цепочкам, то есть лестнице. В работе получены спин-спиновые (псевдоспин-псевдоспиновые) корреляторы, спектры элементарных возбуждений и теплоемкость в широком диапазоне температур и параметра взаимодействии подсистем.

Литература

1. *Каган М.Ю., Кугель К.И., Михеенков А.В.* [*et al.*]. Элементарные возбуждения в симметричной спин-орбитальной модели // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. 207.
2. *Kugel K.I., Sboychakov A.O.*, Streltsov *S.V.* Role of local geometry in the spin and orbital structure of transition metal compounds// JETP. 2016. V. 149. N 3. P. 562.

УДК 539.22

Энергетические зависимости полного сечения резонансного и нерезонансного двумерного квантового диполь-дипольного рассеяния

Е.А. Коваль[1]***, О.А. Коваль***[1,2]
[1]Объединенный институт ядерных исследований
[2]Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН

Исследуется квантовое рассеяние двух произвольно ориентированных диполей в плоскости, моделирующее процессы межмолекулярного взаимодействия в ультрахолодном газе полярных двухатомных молекул в одномерных оптических ловушках. Нестабильность дипольных газов в экспериментах с полярными молекулами в оптических ловушках является одной из нерешенных проблем, причиной которой в том числе могут быть резонансы при двухчастичном рассеянии. Целью данной работы является исследование энергетической зависимости полного сечения диполь-дипольного рассеяния для подтверждения резонансной природы возникающих пиков в зависимости полного сечения от параметров системы (радиуса короткодействующего взаимодействия; угла наклона диполей относительно нормали к плоскости движения).

Квантовое диполь-дипольное рассеяние в плоскости описывается двумерным уравнением Шредингера, которое в дипольных единицах длины $D = \mu d^2 / \hbar^2$ и энергии $E_D = \hbar^6 / \mu^3 d^4$ записывается в безразмерной форме:

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) + V_{SR}(\rho) + V_{dd}(\rho,\phi) \right] \Psi(\rho,\phi) = E\Psi(\rho,\phi) \qquad (1.1)$$

со специальной асимптотикой волновой функции на бесконечности:

$$\Psi(\rho,\phi) \to e^{i\vec{q}\vec{\rho}} + f(q,\phi,\phi_q)\frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}}. \qquad (1.2)$$

Здесь $\vec{q}$ – относительный импульс; E – энергия столкновения; направление падающей волны и угол рассеяния определяются углами ϕ_q и ϕ соответственно; μ – приведенная масса системы, а d – значение дипольного момента ($d_1 = d_2 = d$). Анизотропный потенциал диполь-дипольного взаимодействия параметризуется углами наклона α, γ относительно оси Z первого и второго диполя соответственно и углом β между плоскостями Zd_1 и Zd_2:

$$V_{dd}(\rho,\phi) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3}[\sin(\alpha)\sin(\gamma)\cos(\beta) + \cos(\alpha)\cos(\gamma) - 3\sin(\alpha)\sin(\gamma)\cos(\phi)\cos(\phi-\beta)]. \qquad (1.3)$$

Короткодействующее взаимодействие моделируется бесконечно высоким потенциальным барьером радиуса ρ_{SR}:

$$V_{SR}(\rho) = \begin{cases} \infty, & \rho \leqslant \rho_{SR} \\ 0, & \rho > \rho_{SR} \end{cases} \qquad (1.4)$$

Дифференциальное и полное сечение рассеяния определяются аналогично трехмерному пространству, но в двумерном случае имеют размерность длины, а не площади:

$$\sigma(q) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(q,\phi,\phi_q)}{d\Omega} d\phi_q d\phi \equiv \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \left| f(q,\phi,\phi_q) \right|^2 d\phi_q d\phi. \qquad (1.5)$$

Для решения задачи (1.1) и (1.2) нами применен численный алгоритм, использовавшийся в работах [1, 2] для исследования зависимости сечения рассеяния неполяризованных диполей от взаимной ориентации диполей и радиуса ρ_{SR}. Алгоритм, идея разложения волновой функции которого предложена в работе [3], был успешно верифицирован на задаче квантового рассеяния поляризованных диполей с полным согласием с результатами работы К. Тикнора [4] и показал хорошую сходимость [1].

В работе [2] обнаружены пикообразные зависимости сечения рассеяния от радиуса короткодействующего взаимодействия. Нами численно рассчитаны энергетические зависимости сечения рассеяния в «резонансных» и «нерезонансных» (по пикам сечения рассеяния работы [2]) точках радиуса ρ_{SR}, проиллюстрированные на рис. 1а и рис. 1б красными сплошными и синими пунктирными линиями соответственно. Рисунок 1а соответствует случаю поляризованных (сонаправленных) диполей с углами наклона диполей относительно оси Z: $\alpha = \gamma = 45°$, а рис. 1б – ориентации диполей в плоскости движения $\alpha = \gamma = 90°$. Заметим, что исследуется случай рассеяния различимых частиц. Отличительной особенностью двумерного рассеяния является возрастание полного сечения в низкоэнергетическом пределе из-за расходимости во вкладе s-волны. Однако даже на фоне указанного роста, как видно из рассчитанных зависимостей, в случае резонансного рассеяния полное сечение как минимум на порядок больше сечения в отсутствии резонансов. Таким образом, анализ энергетических зависимостей рис. 1а, 1б подтверждает резонансную природу резких увеличений полного сечения, найденных в работе [2].

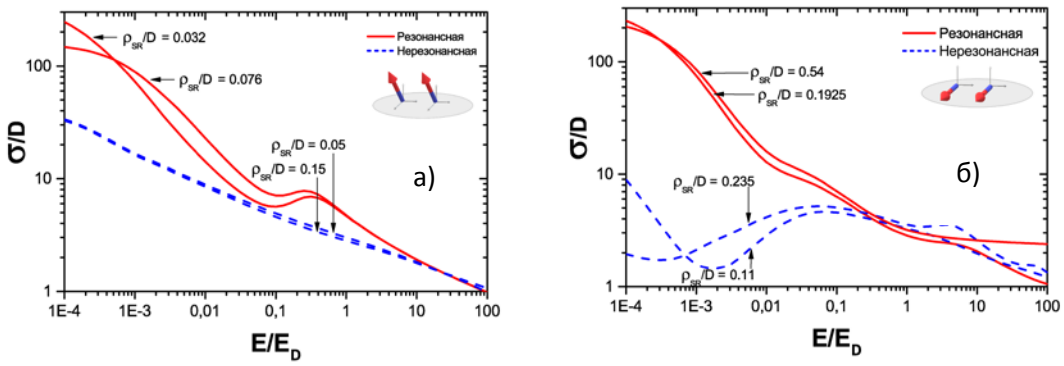


Рис. 1. Энергетические зависимости полного сечения диполь-дипольного рассеяния в «резонансных» (красная сплошная кривая) и «нерезонансных» (синяя пунктирная кривая) (по пикам сечения рассеяния работы [2]) точках радиуса ρ_{SR} при сонаправленной ориентации диполей для углов наклона $\alpha = \gamma = 45°$ (а) и $\alpha = \gamma = 90°$ (б)

Литература

1. *Koval E.A., Koval O.A., Melezhik V.S.* Anisotropic quantum scattering in two dimensions // Physical Review A. 2014. V. 89. N 5. P. 052710.
2. *Koval E.A., Koval O.A.* Short-Range Interaction Impact on Two-Dimensional Dipolar Scattering // EPJ Web of Conferences. 2018. V. 173. P. 06008.
3. *Melezhik V.S.* New method for solving multidimensional scattering problem // Journal of Computational Physics. 1991. V. 92. N 1. P. 67.
4. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering with a tilt // Physical Review A. 2011. V. 84. N 3. P. 032702.

УДК 530.1

Квантовая теория безмассового скалярного поля в двумерном пространстве Минковского при наличии неидеального движущегося зеркала

Л. А. Акопян, Э.Т. Ахмедов

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

Изучено поведение скалярного поля в двумерном пространстве Минковского при наличии неидеального (т. е. пропускающего высокочастотные кванты) движущегося по произвольной траектории зеркала, моделируемого дельта-потенциалом.

Найдены моды разложения скалярного поля в случае зеркала, движущегося по произвольной траектории, показано выполнение канонического коммутационного соотношения на поле и сопряженный импульс.

Рассчитано вакуумное среднее смешанной компоненты тензора энергии-импульса, показано наличие излучения от зеркала, движущегося с ускорением.

Следствием расчетов является то, что в случае неидеального зеркала отсутствуют проблемы, возникающие в задаче идеального зеркала (например, лишние члены в коммутационном соотношении, независимость отражения от частоты волн), а, значит, полученные результаты имеют более осмысленную физическую интерпретацию.

Литература

1. *Akhmedov E.T. and Alexeev S.O.* // Phys. Rev. D. 2017. 96. N 6. 065001. doi:10.1103/PhysRevD.96.065001 [arXiv:1707.02242 [hep-th]].
2. *Birrell N.D. and Davies P.C.W.* doi:10.1017/CBO9780511622632
3. *Davies P.C.W. and Fulling S.A.* // Proc. Roy. Soc. Lond. A. 1976. 348. 393.
4. *Davies P.C.W. and Fulling S.A.* // Proc. Roy. Soc. Lond. A. 1977. 356. 237. doi:10.1098/rspa.1977.0130
5. *DeWitt B.S.* // Phys. Rept. 19 (1975) 295. doi:10.1016/0370-1573(75)90051-4

6. *Astrahantsev L. and Diatlyk O.* // arXiv:1805.00549 [hep-th].
7. *Peskin M.E. and Schroeder D.V.* // Avalon Publishing, 1995.

УДК 519.632.4, 530.1

Об эволюции обобщенных когерентных состояний перевернутого осциллятора в однородном переменном поле

В.В. Чистяков

Санкт-Петербургский научно-исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

Аналитически и численно рассмотрена динамика центра масс и полуширины волнового пакета частицы, находящейся в отрицательном квадратичном потенциале при дополнительном воздействии синусоидального однородного вынуждающего поля. В безразмерных переменных: $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $f = \frac{F}{\omega\sqrt{\hbar m\omega}}$, $\tau = \omega t$ система описывалась нестационарным уравнением Шрёдингера:

$$i\frac{\partial\Psi(\xi,\tau)}{\partial\tau} = -\frac{1}{2}\frac{\partial\Psi(\xi,\tau)}{\partial\xi} - \frac{\xi}{2}\Psi(\xi,\tau) - f\xi\sin(\Omega\tau+\varphi)\Psi(\xi,\tau), \quad (1)$$

при начальном пакете $\Psi(\xi,0) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{i\xi^2}{2} - \frac{\xi^2}{4{\sigma_0}^2}\right)$, асимптотически удовлетворяющем операторному аналогу классических начальных условий с нулевой энергией $E = 0$

$$\hat{c}\Psi(\xi,0) = \left(\hat{p}+\hat{\xi}\right)\Psi(\xi,0) = \left(-i\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi\right)\Psi(\xi,0) \to 0, \sigma_0 \to \infty \quad (2).$$

Задача (1) — (2) допускает точное аналитическое интегрирование в функциях обобщенного гауссовского вида, являющихся аналогом когерентных состояний [1] обычного осциллятора.

Обнаружено, что при начальных разбросах σ_0 координаты ξ, превышающих некоторый порог $\sigma_{0\min} \approx 0.51427360$, эволюционирующий волновой пакет претерпевает аномальное сужение (коллапс) в соответствии с формулой

$$\sigma(\tau,\sigma_0) = \sigma_0\sqrt{e^{-4\tau}\left(1+\frac{1}{16{\sigma_0}^4}\right) - \frac{1}{8{\sigma_0}^4} + \frac{e^{4\tau}}{16{\sigma_0}^4}} \quad (3)$$

от квазимакроскопических значений ~2^{15} до величины порядка 0,5, а затем необратимо расширяется в бесконечность (рис. 1а). При этом качественно меняется внутренний поток перераспределения плотности вероятности внутри пакета от изначально сходящегося к центру масс к расходящемуся от последнего.

Что же касается текущего положения центра масс $\overline{\xi(\tau)}$ волнового пакета, то при определенных фазах φ синусоидального воздействия наблюдался эффект кратковременной стабилизации (рис. 1б) вблизи максимума потенциала на время, примерно равное двум «натуральным» периодам перевернутого осциллятора, т. е. 4π. Затем следовал предположительно бифуркационный уход в левую либо правую бесконечность. Имеющий место коллапс позволяет детально [3] наблюдать эффект стабилизации прежде необратимого расплывания пакета.

Переключающие направление ухода фазы φ зависели от относительной частоты Ω гармонического воздействия по закону, переходящему в классическую формулу $\varphi = -\mathrm{arctg}\Omega$ при увеличении, а не уменьшении начального разброса $\sigma_0 >> 1$. Этот кажущийся парадокс ставит

актуальную проблему применения принципа соответствия для перевернутого осциллятора [2] и для открытых квантовых систем вообще.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 16-08-00997 «Исследование нелинейных многочленных управляемых механических систем методами математического и компьютерного моделирования».

а) б)

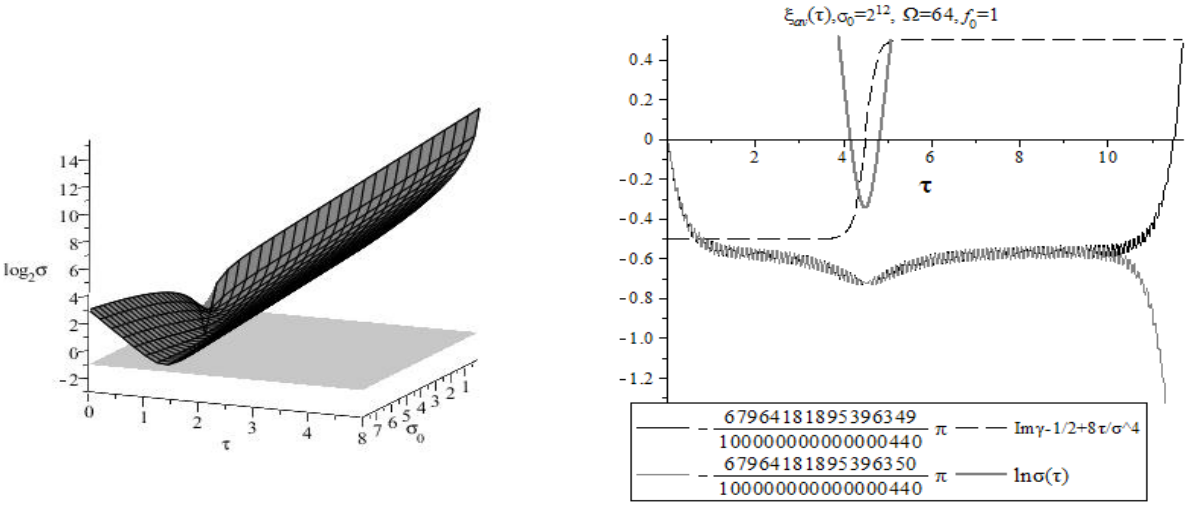


Рис. 1. а) поведение полуширины пакета во времени при различных начальных значениях; б) кинетика центра масс волнового пакета при почти совпадающих фазах возмущения

Литература

1. *Bagrov V., Gitman D.Macedo E.* [*et al.*]. Coherent states of inverse oscillators and related problems // J. Phys. A : Math. Theor. 2013. 46. 325305.
2. *Maamache M. and Choi J.R.* Quantum-classical correspondence for the inverted oscillator // Chinese Phys. C. 2017. 41(11). 113106.
3. *Chistyakov V.V.* On quantum analogue of dynamical stabilization of inverted harmonic oscillator by time periodical uniform field // Pramana J. Phys. 2018. 91:57.

УДК 538.975

Статистическая физика взаимодействующих виртуальных кластеров на случайных ультраметрических деревьях

А.Н. Хлюпин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Изучение термодинамики молекулярных систем около стохастически неоднородных поверхностей в наноразмерных геометриях является актуальной проблемой в современной физической химии [1]. Одной из основных задач является вычисление эффективного потенциала взаимодействия молекулы флюида с молекулами твердой фазы, ограниченной случайно-шероховатой поверхностью. В данной работе развивается теоретический подход на основе усреднения функционала свободной энергии [2] для объяснения температурной зависимости эффективного потенциала взаимодействия в случае сильногетерогенных поверхностей. Данная зависимость наблюдается при моделировании методом Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) [3].

В докладе будет рассмотрена статистическая физика системы из взаимодействующих виртуальных кластеров и продемонстрирована связь данной модели с термодинамикой флюида при взаимодействии с неоднородными поверхностями твердой фазы. Особенностью системы является случайный характер парного потенциала взаимодействия, зависящего от ультраметрического расстояния между кластерами в некотором случайном дереве. Вероятностная модель в ансамбле таких деревьев определяется статистическими свойствами случайной поверхности.

Задача вычисления свободной энергии, усредненной по вероятностной мере случайных полей или случайных парных взаимодействий, естественным образом возникает в теории систем с «замороженным» беспорядком: теории стекол [4], теории спиновых систем на случайных графах [5], при описании термодинамики монослоя на случайно-искривленных поверхностях [6]. Для осуществления этой процедуры используется метод реплик.

В работе последовательно определяется случайный процесс суммирования на ребрах случайного ветвящегося дерева, приводящий к возникновению ультраметрического потенциала. Получено нелинейное интегральное уравнение для плотности вероятности эффективных локальных полей, определяющей свободную энергию системы в рамках реплично-симметричного анзаца [7]. Численный анализ данных уравнений проводится алгоритмами популяционной динамики. В докладе будут рассмотрены результаты сравнения полученной модели с численным моделированием методом Монте-Карло.

Литература

1. *Aslyamov T., Khlyupin A.* Density functional theory formulation for fluid adsorption on correlated random surfaces // The Journal of chemical physics. 2017. V. 147. N 15. P. 154703.
2. *Khlyupin A., Aslyamov T.* Random Process Theory Approach to Geometric Heterogeneous Surfaces: Effective Fluid–Solid Interaction // Journal of Statistical Physics. 2017. V. 167. N 6. P. 1519–1545.
3. *Forte E.* [*et al.*]. Effective coarse-grained solid–fluid potentials and their application to model adsorption of fluids on heterogeneous surfaces //Physical Chemistry Chemical Physics. 2014. V. 16. N 36. P. 19165–19180.
4. *Erichsen Jr R., Theumann W. K.* Phase transitions in the three-state Ising spin-glass model with finite connectivity //Physical Review E. 2011. V. 83. N 6. P. 061126.
5. *Doria F. F.* [*et al.*]. Random field Ising model in a random graph //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2015. V. 422. P. 58–65.
6. *Khlyupin A.N.* Effects of smooth random surface on fluid monolayer thermodynamics //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2016. V. 774. N 1. P. 012024.
7. *Nikoletopoulos T.* [*et al.*]. Replicated transfer matrix analysis of Ising spin models on ‘small world’lattices //Journal of Physics A: Mathematical and General. 2004. V. 37. N 25. P. 6455.

СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ

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

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

Секретарь: М.Н. Коноплева (к.б.н.)

Дата: 19.11.2018

Время: 14:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 7, ауд. 106-107 БФК, МФТИ

УДК 57.087

Комбинированные измерения митохондриального дыхания и продукции активных форм кислорода в тканях мозга

И.О. Зыков[1]***, S. Astori***[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Laboratory of Behavioral Genetics, Brain Mind Institute, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne

Лаборатория поведенческой генетики (LGC, Brain Mind Institute, EPFL, Switzerland), на базе которой была проведена работа, исследует механизмы, связывающие личностную тревожность и социальное поведение. Предыдущая работа группы (1) выявила роль митохондриальной функции в прилежащем ядре в стриатуме. При помощи респирометрии высокого разрешения было обнаружено, что у крыс с низким уровнем тревожности митохондриальное дыхание в прилежащем ядре выше по сравнению с крысами с высоким уровнем тревоги. В то же время было показано, что уровень митохондриального дыхания связан с опытом социальной конкуренции. Кроме того, у крыс с низкой тревожностью была обнаружена более низкая продукция активных форм кислорода (АФК). Однако уровень АФК измерялся косвенно с помощью иммуноферментного анализа гидроксиноненала.

Для проведения респирометрии высокого разрешения и измерении флуоресценции продукции H_2O_2 был использован гомогенат свежеприготовленных участков мозга, содержащих прилежащее ядро. Ткань мозга была получена от молодых взрослых мышей (5–8 недель). Для измерения митохондриального дыхания в прилежащем ядре были использованы оксиграфы «Oroboros Oxygraph-2k» с флуоресцентными LED-модулями, которые позволяют измерять потребление O_2 с высоким разрешением. Гомогенеаты прилежащего ядра были разбавлены в буфере MiR05 (2) в различных концентрациях (от 0,05 мг/мл до 2 мг/мл) и вводились в камеры оксиграфа. В качестве флюрофора для измерения продукции перекиси водорода был использован Amplex UltraRed (AMR). Для катализа реакции H_2O_2 и AmR использовалась пероксидаза хрена (HRP). В результате реакции наблюдалась флюоресценция на красных длинах волн (максимум интенсивности поглощения на длине волны 563 нм, максимум интенсивности излучения на длине волны 587 нм).

Митохондрии производят АТФ при помощи окислительного фосфорилирования посредством электрон-транспортной цепи. Существует три протонных насоса (комплекс I, III и IV), которые генерируют трансмембранный протонный градиент, используемый для получения АТФ посредством АТФ-синтазы. Измерение дыхания выполнялось путем добавления соединений, которые повышают или угнетают функцию специфических митохондриальных комплексов (рис. 1):

- Малат (m), пируват (p) и глутамат (g) повышают функцию комплексов I и III. Состояние «LEAK».

- АДФ (d) способствует функции комплекса I. Состояние «CI».
- Сукцинат (s) способствует функции комплекса III. Состояние «CI + CII».
- FCCP (u) uncoupler: функция электрон-транспортной цепь не ограничена стабилизацией градиентов концентрации. Измеряется предельная пропускная способность комплексов I и III. Состояние «ets».
- Ротенон (rot) блокирует комплекс I. Измеряется максимальная пропускная способность комплекса III. Состояние «ets CII».
- Антимицин А (ama) блокирует электрон-транспортную цепь. Таким образом, измеряется не относящееся к окислительного фосфорилированию потребление кислорода. Состояние «rox».

Был разработан протокол параллельных измерений митохондриального дыхания и продукции АФК в свежей мозговой ткани, а также определены критические этапы калибровки флуоресцентного сигнала и анализа данных.

1. Чувствительность AmR изменяется за время эксперимента (2 ч). Калибровка сигнала флуоресценции должна повторяться в разные моменты времени, измерения флуоресценции должны выполняться относительно ближайшей калибровки (рис. 1). Во избежание значительной потери чувствительности AmR общее время записи должно быть ограничено двумя часами.

2. Как и ожидалось, существует линейная зависимость между уровнем митохондриального дыхания и концентрацией тканей. Однако для значений АФК линейная связь не выполняется для для состояний «ets CII» и «rox» (рис. 2)

3. Нормализация данных по концентрации тканей мозга свидетельствует о невозможности получения достоверных данных об уровне продукции АФК при концентрации менее 0,5 мг/ мл (рис. 3)

4. Наиболее оптимальные результаты для уровней АФК получены при нормализации флуоресцентного сигнала по уровню митохондриального дыхания в состоянии «ets CII» (рис. 4)

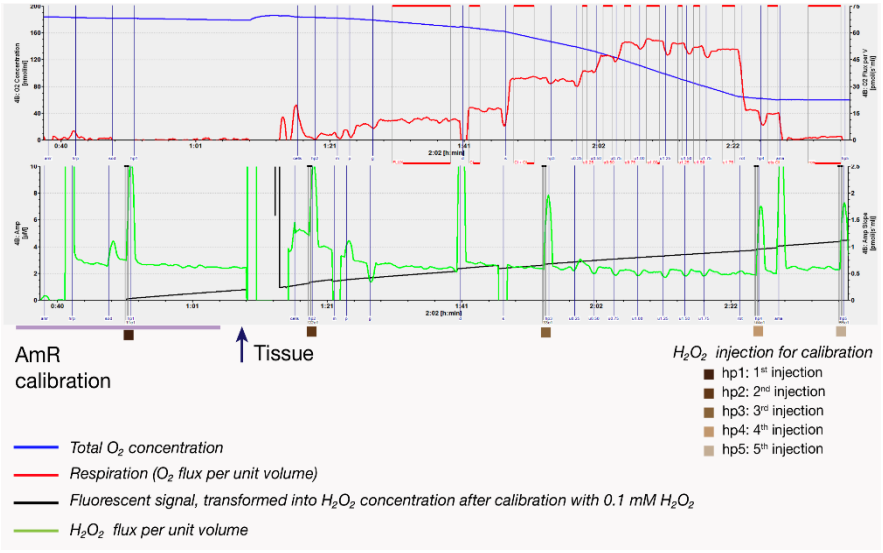


Рис. 1. Калибровка исходных данных, полученные непосредственно с оксиграфа

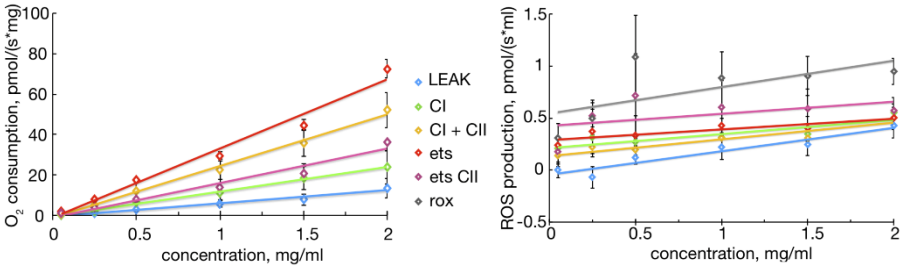


Рис. 2. Линейная зависимость уровней потребления кислорода и продукции активных форм кислорода в зависимости от концентрации тканей мозга

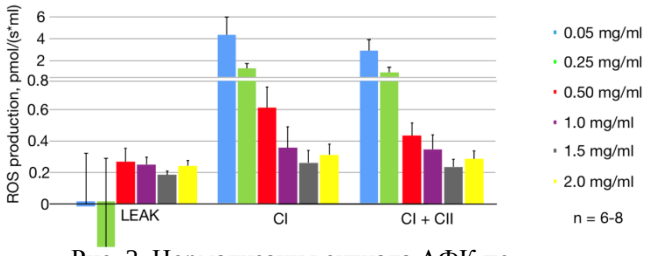


Рис. 3. Нормализация сигнала АФК по концентрации тканей для различных состояний

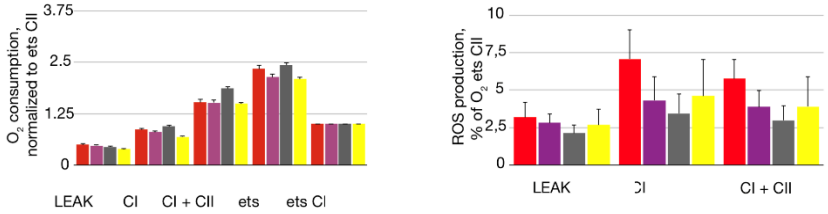


Рис. 4. Нормализация сигнала АФК для различных состояний по уровню митохондриального дыхания в состоянии «ets CII»

Работа выполнена при поддержке фонда «Нева» и Школы наук о жизни Федеральной политехнической школы Лозанны (Лозанна, Швейцария) на базе лаборатории поведенческой генетики Института Мозга Федеральной политехнической школы Лозанны (Лозанна, Швейцария)

Литература

1. *Hollis F., van der Kooij M.A., Zanoletti O., Lozano L., Canto C., Sandi C.* Mitochondrial function in the brain links anxiety with social subordination. Proc Natl Acad Sci USA 2015. 112. 15486–15491.
2. *Komlodi T., Sobotka A., Krumschnabel G., Doerrier C., Bezuidenhout N., Hiller E., Gnaiger E.* Comparison of mitochondrial incubation media for measurement of respiration and hydrogen peroxide production. Mitochondrial bioenergetics: methods and protocols, Springer, New York 2018.

УДК 577.322

Биохимическое и биофизическое исследование CYP136 *M.tuberculosis*

С. Бухдрукер[1], Т. Сушко[2,3], С. Смольская[2,4], А. Василевская[2], А. Ковалевский[2], Е. Марьин[1], С. Усанов[2], В. Борщевский[1], Н. Струшкевич[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт Биоорганической Химии НАН Беларуси
[3]IMSUT, The University of Tokyo
[4]Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова

Туберкулёз – это тяжёлое инфекционное заболевание обычно вызываемое бактерией *Mycobacterium tuberculosis.* Микобактериальный геном насчитывает 20 цитохромов P450 (MtbCYPs), которые, согласно существующим данным, играют важную роль в патогенности и жизнеспособности бактерий. Таким образом, изучение CYP-специфичных ингибиторов с высокой вероятностью приведёт к разработке новых лекарств против туберкулёза.

Хотя CYP136 *M.tubercuosis* является наиболее близким соседом к микобактериальной ланостерол 14-альфа демитилазе (CYP51) – одному из функционально охарактеризованных MtbCYPs, на текущий момент белок изучен плохо. В данной работе было проделано молекулярное клонирование, гетерогенная экспрессия и очистка MtbCYP136 [1]. В отличие от остальных растворимых бактериальных CYPs, для очистки MtbCYP136 необходим детергент, что говорит нам о возможной связи белка с мембраной. Изучение взаимодействий CYP136 с различными лигандами методом УФ-спектроскопи позволило обнаружить сильную связь белка с азол-содержащими соединениями – широко используемыми ингибиторами цитохромов P450. Измерения констант

диссоциации (Kd) показали высокую аффиность связывания CYP136 с клотримазолом и эконазолом (Kd = 0.09 мкМ и Kd = 1.7 мкМ соответственно). Также нами было показано, что цитохром вероятно вовлечён в метаболизм липидов. Для измерения параметров связывания различных лигандов нами была использована изотермическая калориметрия (ITC), с помощью которой получилось измерить энтальпию, энтропию и энергию Гиббса для взаимодействия CYP с азолами.

Спектр кругового дихроизма CYP136 показывает наличие в белке альфа-спиральных и бета-листовых областей. Для изучения стабильности цитохрома была использована дифференциальная сканирующая калометрия (DSC), которая показала наличие у белка двух точек плавления. С помощью динамического светорассеяния было показано, что CYP136 в основном находится в мономерной форме.

Цитохрому P450 необходим редокс партнёр для катализа. На данный момент имеется ограниченная информация о взаимодействии микобактериальных CYPs с их природными партнёрами. По данной причине нами были проанализированы параметры связывания потенциального редокс партнёра методом ITC. DSC была использована для оценки изменения термической стабильности в результате взаимодействия цитохрома с партнёром.

Данная работа была поддержана совместным исследовательским грантом Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (X18P-098) и Российским фондом фундаментальных исследований (18-54-00030)

Литература

1. *Vasilevskaya A.* [*et al.*]. Molecular cloning, heterologous expression, isolation and ligand-binding properties of the Mycobacterium tuberculosis cytochrome CYP136 // Proceedings of the NASB. Series of chemical sciences. 4, 2012.

УДК 577.322

Исследование конформационной динамики мембранных белков с помощью индуцированных белком изменений фотофизических параметров флуоресценцентной метки

***И.В. Маслов*[1], *Н.С. Ильинский*[1], *П.А. Хорн*[1], *В.К. Вистунов*[1], *Н.А. Сафронова*[1], *П.К. Кузьмичёв*[1], *А.М. Максутов*[1], *А.О. Богородский*[1], *Т. Генш*[2], *А.В. Мишин*[1], *В.Г. Черезов*[1,3], *В.И. Борщевский*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Институт сложных систем и клеточной биофизики (ICS-4: Cellular Biophysics)
Исследовательский центр Юлих
[3] Университет Южной Калифорнии (USC)

Мембранные белки – технически сложные объекты исследования, однако понимание механизмов их работы необходимо для разработки современных лекарственных средств. Постоянное развитие методов структурной биологии приводит к углублению знаний о статической структуре мембранных белков и их комплексов с действующими молекулами лекарств. Кроме статических структурных данных для понимания функциональных свойств белка необходима информация о его конформационном пространстве и динамике. Из-за гетерогенности образца и сложности синхронизации состояний различных молекул в его составе такая информация практически недоступна для наблюдения методами, требующими усреднения свойств белка по ансамблю. Удобным методом исследования конформационной динамики мембранных белков, напротив, является флуоресцентная микроскопия одиночных молекул.

В данной работе, чтобы определить число конформационных состояний целевого белка, их населенность и кинетические параметры переходов между состояниями, мы используем чувствительность флуоресцентных меток Cy3 и Cy5 к белковому окружению (PIFE эффект) и измеряем интенсивность, время жизни и анизотропию флуоресценции одиночных флуорофоров, связанных с целевым белком. Для подготовки образца мы оптимизировали протоколы (1) экспрессии, солюбилизации и очистки целевого белка, (2) специфичного мечения мембранного белка флуоресцентной меткой, (3) встраивания целевого белка в нанодиски, (4) иммобилизации нанодисков с белком на поверхности покровного стекла в оптическом пути флуоресцентного

микроскопа. Кроме того, мы (5) провели измерения параметров флуоресценции одиночных молекул, свободно диффундирующих в растворе, чтобы оценить чувствительность этих параметров к конформационным изменениям и исключить артефакты иммобилизации.

Данная работа была поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации, проект №6.9909.2017/ВУ.

УДК 577.352.27

Дизайн и синтез новых амфифильных полимеров для изучения мембранных белков методом поверхностного плазмонного резонанса

А.Э. Михайлов, П.К. Кузьмичев, В.В. Чупин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

На сегодняшний день изучение мембранных белков (МБ) является актуальной проблемой. В данной работе мы предложили новый подход к изучению взаимодействий между лигандами и их рецепторами при помощи метода поверхностного плазмонного резонанса (ППР). Основным преимуществом метода ППР над традиционными является возможность точного измерения кинетики взаимодействия лиганда с белком-рецептором.

Основными проблемами при исследовании МБ методом ППР является низкая растворимость МБ в водных буферных растворах, для решения которой могут быть использованы амфифильные полимеры, а также необходимо разработать эффективный способ иммобилизации на поверхность чипа, например, использовать чип с нанесенным белком стрептавидином.

Нами был предложен новый подход для иммобилизации мембранных белков, для которого был синтезирован новый солюбилизирующий амфифильный полимер. Он представляет собой уже известный ранее амфифильный полимер (A8-35) [1] и пептид – лиганд стрептавидина. Твердофазным методом нами были синтезированы два пептида-лиганда: WSHPQFGG и GGGGCWHPQAGC (с внутримолекулярной дисульфидной связью). Каждый из них имеет специфичную для взаимодействия со стрептавидином последовательность HPQ. Пептид-лиганд GGGGCWHPQAGC показал хорошее сродство к стрептавидину, в отличие от другого пептида WSHPQFGG. В дальнейшем нами будет подробно изучено связывание конструкции A8-35-GGGGCWHPQAGC со стрептавидином и солюбилизация мембранных белков в водных растворах.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (грант номер 6.3157.2017/РР).

Литература

1. *Popot J.-L.* Membrane Proteins in Aqueous Solutions. Biological and Medical Physics Biomedical Engineering Cham. Springer International Publishing, 2018. 708 p.

УДК 577.22

Исследования сенсорного домена бактериальной гистидин киназы QseC

И.М. Гончаров, В.В. Назаренко, А. Ремеева, И.Ю. Гущин

Московский физики-технический институт (государственный университет)

Желудочно-кишечный тракт (ЖКТ) представляет собой место наиболее сложной гетерогенной среды у млекопитающего, где большая часть микробной флоры находится в толстой кишке [1]. Бактериальная флора необходима млекопитающему для корректного усваивания питательных веществ [2]. Среди бактерий существуют патогены, которые при попадании в организм могут быть причиной различных кишечных заболеваний. Благодаря большому разнообразию и плотности бактерий в желудочно-кишечном тракте происходит их взаимодействие друг с другом и с организмом посредством различных сигнальных систем [3].

Одной из таких сигнальных систем является кворум-чувствительная сигнальная система, включающая в себя два белка QseC и QseB. В этой двухкомпонентной системе QseC является бактериальным адренергическим рецептором, который активирует транскрипцию генов вирулентности через белок-регулятор ответа QseB. QseC способен чувствовать присутствие адреналина и норадреналина, а также реагирует на присутствие бактериального автоиндуктора 3 (AI-3) [4]. Учитывая то, какую роль играет эта система в бактериальной вирулентности, характеризация этого сигнального механизма может способствовать разработке новых антимикробных препаратов.

В данной работе изучался сенсорный домен бактериальной гистидин киназы QseC. Для проведения исследований были созданы четыре генетические конструкции: две конструкции, содержащие только сенсорный домен и две генетические конструкции, которые помимо сенсорного домена содержали еще флуоресцентный LOV домен. В данной работе удалось показать, что заряженные трансмембранные участки α-спиралей играют большую роль в стабилизации сенсорного домена. Помимо этого, удалось определить буферные компоненты, способные улучшить стабильность белка. Также было показано, как флуоресцентные химерные конструкции могут быть полезны в экспериментах по изучению взаимодействия белка с лигандом, а также при контроле экспрессии и очистки.

Исследования проводятся при поддержке РНФ (проект № 18-74-10053).

Литература

1. *Berg R.D.* The indigenous gastrointestinal microflora // Trends Microbiol. 1996. 4. 430–435.
2. *Hooper L.V.* Commensal Host-Bacterial Relationships in the Gut // Science. 2001. 292. 1115–1118.
3. *Krell T.* [*et al.*]. Bacterial Sensor Kinases: Diversity in the Recognition of Environmental Signals // Annu. Rev. Microbiol. 2010. 64. 539–559.
4. *Clarke M.B., Hughes D.T., Zhu C., Boedeker E.C. & Sperandio V.* The QseC sensor kinase: A bacterial adrenergic receptor // Proc. Natl. Acad. Sci. 2006. 103. 10420–10425.

УДК 577.22

О тесной связи воспалительных процессов и старения организма

Н.А. Сафронова

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Старение само по себе болезнью не является. С возрастом организм накапливает в себе множество разных молекулярных и клеточных сбоев, которые в совокупности приводят к отклонениям в тканях и органах и в дальнейшем к заболеваниям.

Есть несколько свидетельств о том, что старение тесно взаимосвязано с воспалительными процессами в организме:

1. Иммунная система с возрастом теряет свой потенциал;
2. Редокс-статус организма с возрастом меняется, а свободные радикалы могут вызывать реакции иммунного ответа;
3. ВИЧ-инфицированные пациенты претерпевают преждевременное старение.

В данной работе сначала будут рассмотрены основные теории старения человека, затем дана общая информация о воспалительных процессах и их молекулярных механизмах. В заключение будут перечислены основные возрастные заболевания и участие медиаторов воспаления в их развитии.

УДК 577.352.332

Моделирование белок-липидного комплекса ротора АТФ-синтазы

О.С. Новицкая, П.И. Буслаев, И.Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

АТФ-синтаза представляет собой крупный мультибелковый ферментативный комплекс, который был обнаружен во всех царствах живых организмов, в частности в клеточных мембранах бактерий, в митохондриях и хлоропластах эукариот. В состав комплекса входят две субъединицы, одна из которых находится в растворе, а вторая – в липидном бислое (рис. 1). Образованное 8–15 *c*-субъединицами *c*-кольцо содержится в мембранной части белка и вращается в липидном окружении во время процесса синтеза молекул АТФ. Несмотря на давний интерес к АТФ-синтазе, только недавно были получены атомные структуры высокого разрешения отдельных *c*-колец и всего комплекса. В данной работе, мы предлагаем компьютерный метод для сборки белок-липидных систем *c*-колец. Полученные структуры остаются устойчивыми в моделировании на протяжении долгого времени, а положения липидов хорошо соотносятся с экспериментальными данными (рис. 1).

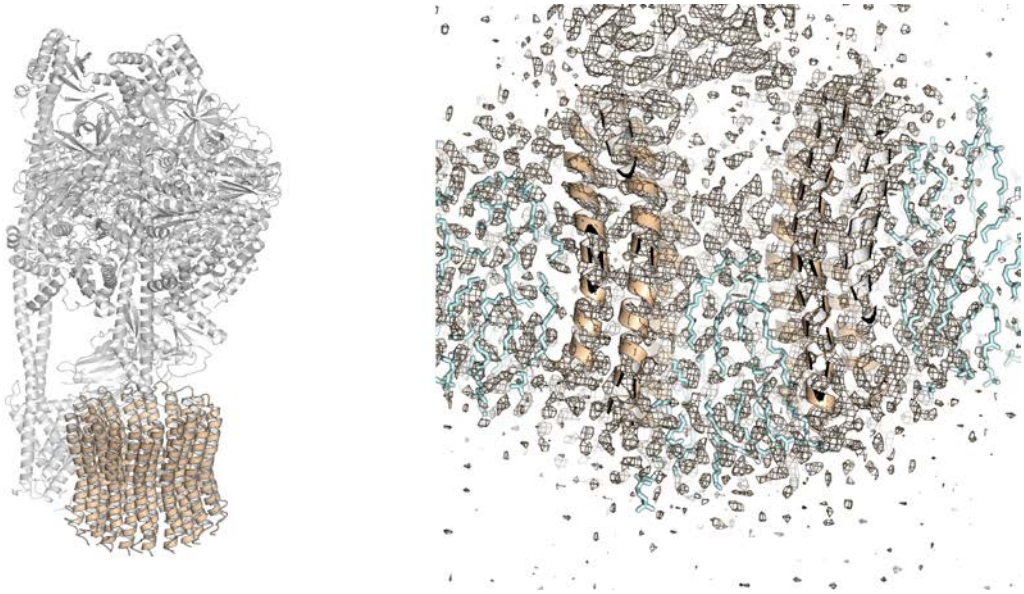


Рис. 1. Экспериментально определенная структура АТФ-синтазы из шпината (слева) и сравнение полученных положений липидов с экспериментальными электронными плотностями (справа)

Литература

1. *Walker J.E.* The ATP synthase: the understood, the uncertain and the unknown // Biochem. Soc. Trans. 2013. (1-16). 41.
2. *Kühlbrandt W. & Davies K.M.* Rotary ATPases: A New Twist to an Ancient Machine // Trends Biochem. Sci. 2016. (106–16) 41.

УДК 577.29

Молекулярные механизмы G-белковой активации, исследованные микроскопией одиночных молекул и двухфотонной поляризационной микроскопией

***В. Вистунов*[1], *Д. Олейник*[2], *А. Бондарь*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Educational and Scientific Center “Institute of Biology and Medicine”, Taras Schevchenko National University of Kiev
[3]Augusta University, Georgia, USA

Гетеротримерные G-белки являются важными игроками в передаче сигналов рецепторами, сопряженными с G-белком (GPCR). Несмотря на многочисленные исследования, некоторые биологические механизмы G-белковой активации остаются неясными [1]. В данной работе мы сосредоточились на двух вопросах передачи сигналов посредством G-белков.

Во-первых, мы определили, что G-белки двух разных семейств претерпевают разные гетеротримерные превращения. Мы показали, что Gi-белки (ингибирующие) диссоциируют на свободные субъединицы Gαi и димеры Gβγ, в то время как Gs-белки (стимулирующие) подвергаются перегруппировке после активации GPCR. Для того чтобы обнаружить белок-белковые взаимодействия в живых клетках, мы применили двухфотонную поляризационную микроскопию [2].

Во-вторых, мы экспериментально проверили гипотезу, что G-белки проводят недостаточно времени в клатриновых структурах (CCSs) для их координированной интернализации вместе с GPCR. Мы разработали алгоритм анализа данных, полученных с помощью микроскопии одиночных молекул, который вычисляет средние времена локализации частиц в CCSs, а также определяет тип диффузионного движения белков на клеточной мембране. Мы обнаружили, что большая часть β2-адренорецепторов проводит примерно 500 мс в клатриновых структурах после стимуляции лигандом, в то время как средний интервал пребывания G-белков в CCSs составляет всего 150 мс.

Таким образом, наши результаты показывают, что различные семейства G-белков проявляют различные формы гетеротримерного превращения и что перемещения молекул рецептора и молекул G-белка в эндосомы, для последующей сигнальной трансдукции оттуда, реализуются двумя разными механизмами.

Литература

1. *Bondar A. and Lazar J.* Dissociated GαGTP and Gβγ subunits are the major activated form of heterotrimeric Gi/o proteins // J. Biol. Chem. 2013 V. 293 P. 121-132.
2. *Lazar J.* [*et al*.] Two-photon polarization microscopy reveals protein structure and function // Nat. Meth. 2011 V. 1038 P. 13-21.

УДК 577.22

Структурные и биофизические исследования термостабильного флуоресцентного белка на основе LOV-домена

***В.В. Назаренко*[1], *А.А. Ремеева*[1], *А.Н. Юденко*[1], *К.В. Ковалев*[1,2,3,4], *И.М. Гончаров*[1], *А.В. Рогачев*[1,5], *В.И. Горделий*[1,2,3], *И.Ю. Гущин*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany
[3]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS, Grenoble, France
[4]Institute of Crystallography, RWTH Aachen University, Aachen, Germany
[5]Объединенный институт ядерных исследований

Light-Oxygen-Voltage (LOV) домены являются консервативными частями фоторецепторов растений, бактерий и грибов, связывающими флавинмононуклеотид (ФМН) в качестве хромофора и действующими как синие светочувствительные элементы этих фоторецепторов. Фотовозбуждение флавинового хромофора индуцирует в LOV-доменах конформационные изменения, которые приводят к активации различных эффекторных доменов, таких как киназы, эстеразы и ДНК-связывающие мотивы. С недавнего времени LOV-домены используются в разработке новых флуоресцентных репортерных белков (так называемых флавин-связывающих флуоресцентных белков, FbFPs), которые из-за их способности флуоресцировать в анаэробных условиях, быстрой кинетики сборки, а также небольшого размера ~ 12–16 кДа стали многообещающей репортерной системой для количественного анализа биологических процессов в реальном времени [1].

В данной работе представлен небольшой термостабильный флавин-связывающий белок CagFbFP, полученный из LOV-домена растворимой гистидинкиназы термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans*. Белок CagFbFP имеет длину 107 аминокислотных остатков и состоит только из основного консервативного участка LOV-домена, в котором отсутствуют спирали A'α и Jα, участвующие в передаче сигнала. Белок является термостабильным с температурой плавления около 66 °C, которая не зависит от концентрации NaCl; также он подвергается рефолдингу в растворах, содержащих до 500 мМ NaCl. В кристаллической структуре CagFbFP, полученной с разрешением 1,07 Å, было обнаружено, что ключевой сигнальный остаток глутамина 148 находится в двух альтернативных конформациях. Как кристаллическая структура, так и эксперимент с малоугловым рассеянием показали, что белок является димером. В целом белок представляет собой многообещающую модель для структурных исследований LOV-доменов и может быть использован в качестве флуоресцентного репортера.

Исследования проводятся при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-34-00742).

Литература

1. *Wingen Marcus, Potzkei Janko, Endres Stephan, Casini Giorgia, Rupprecht Christian, Fahlke Christoph, Krauss Ulrich, Jaeger Karl-Erich, Drepper Thomas, Gensch Thomas.* The photophysics of LOV-based fluorescent proteins – new tools for cell biology // Photochemical & Photobiological Sciences. 2014. V. 13. P. 875-883.

УДК 576.08

Исследование динамики митохондриальной сети при помощи фотоконвертируемого белка Dendra2

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

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Баланс между процессами слияния и деления митохондрий формирует фенотип митохондриальной сети, и является крайне важным для её надлежащего функционирования.

Паталогии динамики митохондриальной сети ассоциируют с болезнями сердечно-сосудистой и нервной систем, связанными с возрастом.

Для изучения динамики митохондриальной сети при помощи флуоресцентной микроскопии мы создали клеточную линию HEK293 (human embryonic kidney), стабильно экспрессирующую фотоконвертируемый флуоресцентный белок Dendra2 [1], таргетируемый в митохондрии. Для этого мы трансдуцировали клетки HEK при помощи лентивирусного вектора и изолировали единичный клон с высоким уровнем экспрессии белка. Таким образом, мы получили генетически однородную популяцию клеток с постоянным уровнем экспрессии белка Dendra2.

Нам удалось добиться высокоточной, выборочной конверсии белка Dendra2 в определяемых нами областях митохондриальной сети и наблюдать перераспределение сигнала от фотоконвертированного белка по разным частям клетки с течением времени. Для количественного исследования митохондриальной морфологии мы использовали алгоритмы обработки изображений, реализованные в плагине MiNa для ImageJ [2], а также предложили другой количественный подход к анализу данных, основанный на колоколизации конвертированной и неконвертированной компонент.

В качестве стартовой точки наших экспериментов по анализу дисфункции митохондрий мы индуцировали изменения в митохондриальной сети при помощи окислительного стресса (посредством воздействия H2O2) и вещества, сбрасывающего мембранный потенциал (CCCP, carbonyl cyanide m-chlorophenylhydrazon).

Работа была выполнена в рамках правительственного задания (Министерство образования и науки Российской Федерации, проект №6.9909.2017/ВУ)

Литература

1. *Chudakov D.M., Lukyanov S. & Lukyanov K.A.* Using photoactivatable fluorescent protein Dendra2 to track protein movement // Biotechniques 2007. V. 42. P. 553–565.
2. *Valente A.J., Maddalena L.A., Robb E.L., Moradi F. & Stuart J.A.* A simple ImageJ macro tool for analyzing mitochondrial network morphology in mammalian cell culture. // Acta Histochem. 2017. V. 119, P. 315–326.

УДК 577.353.332

Применение метода главных компонент для исследования динамики липидов в мембранных системах

П. Буслаев, Х. Мустафин, И. Гущин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Моделирование мембранных систем методом молекулярной динамики (МД) является удобным подходом для определения как свойств самих мембран, так и аспектов взаимодействия мембран с небольшими молекулами и белками [1]. В основе МД лежит численное решение уравнений классической механики Ньютона для системы взаимодействующих частиц, что позволяет рассчитать эволюцию координат всех атомов изучаемой системы во времени.

В настоящий момент существуют различные методы для анализа полученных данных о конформационной динамике мембранных систем, однако все они скорее качественные, чем количественные. В данном докладе представлен метод анализа динамики мембранных систем на уровне отдельных молекул липидов при помощи метода главных компонент. Такой подход позволяет количественно описать и сравнить происходящие в мембранах движения [2]. С помощью метода анализа конформаций молекул липидов сравниваются различные наборы параметров, описывающих взаимодействия между атомами в мембранных системах [2, 3], описываются сложные мембранные системы, такие как гексагональная липидная фаза и липидная везикула, а также описываются такие явления, как фазовый переход, упорядочение (ordering effect) и эффект конденсации. Для ускорения процесса анализа конформаций молекул липидов методом главных компонент планируется разработать программное обеспечение на базе языка Python. Это позволит значительно быстрее и точнее описывать поведение разнообразных мембранных систем.

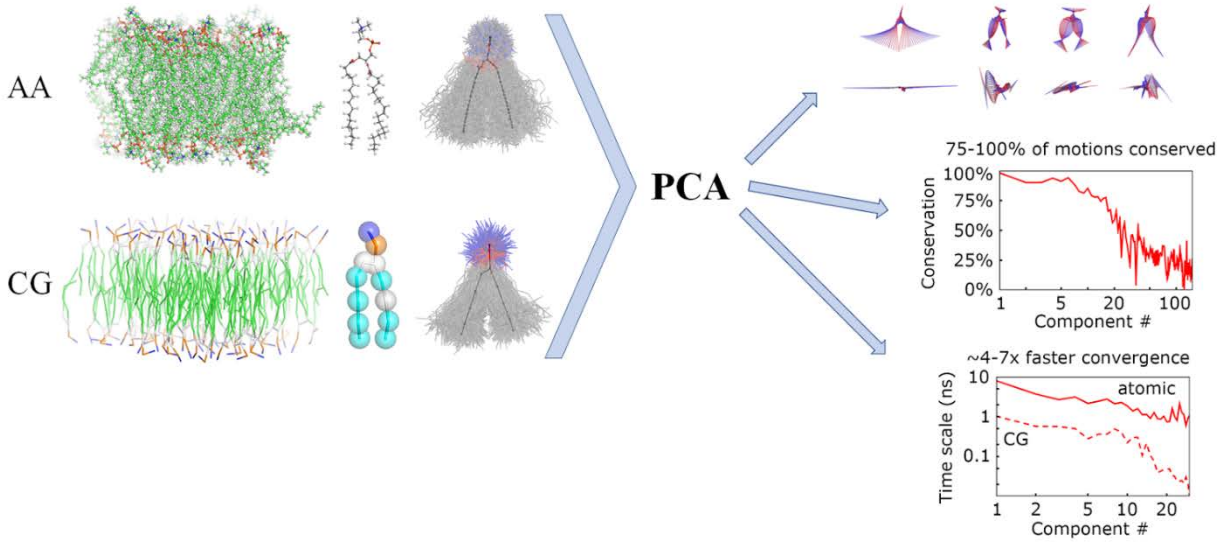


Рис. 1. Анализ конформаций молекул липида методом главных компонент

Литература

1. *Lindahl E.R.* Molecular Dynamics Simulations // Meth. Mol. Biol. 2008. V. 443 P. 3–23.
2. *Buslaev P., Gordeliy, Grudinin S., Gushchin I.* Principal component analysis of lipid molecule conformational changes in molecular dynamics simulations // J. Chem. Theory Comput. 2016. V. 12 N 3 P. 1019-1028.
3. *Buslaev P., Gushchin I.* Effects of Coarse Graining and Saturation of Hydrocarbon Chains on Structure and Dynamics of Simulated Lipid Molecules // Scientific Reports. 2017. V. 7.

УДК 577.22

Исследование вариантов термостабильного флуоресцентного белка на основе LOV-домена

***А.А. Ремеева*[1], *В.В. Назаренко*[1], *К.В. Ковалев*[1,2,3,4], *А.Н. Юденко*[1], *И.М. Гончаров*[1], *В.И. Горделий*[1,2,3], *И.Ю. Гущин*[1]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Институт структурной биохимии ICS-6, Исследовательский Центр Юлих, Германия
[3] Институт структурной биологии, Университет Гренобля, Гренобль, Франция
[4] Институт кристаллографии, Университет Ахена, Ахен, Германия

Флавин-связывающие флуоресцентные белки (FbFPs) – это небольшие, не зависящие от кислорода флуоресцентные белки, происходящие из семейства LOV(Light Oxygen Voltage)-доменов растений, бактерий и грибов. Они связывают флавин-мононуклеотид (FMN) в качестве хромофора и отвечают за чувствительность организмов к голубому свету. Одним из ключевых аминокислотных остатков для белков данного класса является глутамин, расположенный в непосредственной близости от хромофора и играющий центральную роль в передаче сигнала. Предполагается, что мутирование данного остатка может оказывать влияние на оптические свойства белков [1, 2], однако на сегодняшний день нет никаких экспериментальных данных о структуре таких мутированных белков и об изменении хромофорного окружения в связи с мутациями.

В данной работе представлены результаты биофизических и структурных исследований вариантов термостабильного флавин-связывающиго флуоресцентного белка из термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans* (CagFbFP) с мутациями ключевого глутамина на различные полярные и заряженные аминокислоты. Спектры абсорбции и флуоресценции демонстрируют сдвиг в голубую область максимумов поглощения и излучения флуоресценции (до 9 нм) для мутированных вариантов в сравнении с исходным CagFbFP. Исследования теромостабильности образцов показали, что мутированные варианты в целом менее стабильны, чем CagFbFP, что может

препятствовать проведению исследований подобных мутаций в случаях, когда начальный LOV-домен не термостабилен. Все изучаемые белки с мутациями были успешно закристаллизованы, пространственные структуры высокого разрешения определены и позволили наблюдать различные варианты организации хромофор-связывающей области белка.

Данное исследование выполнено при поддержке РНФ (проект № 18-74-00092).

Литература

1. *Davari M.D., Kopka B., Wingen M., Bocola M., Drepper T., Jaeger K.E., Schwaneberg U., Krauss U.* Photophysics of the LOV-Based Fluorescent Protein Variant iLOV-Q489K Determined by Simulation and Experiment // J. Phys. Chem. B. 2016. V. 120. P. 3344–52.
2. *Khrenova M.G., Nemukhin A.V., Domratcheva T.* Theoretical Characterization of the Flavin-Based Fluorescent Protein iLOV and its Q489K Mutant // J. Phys. Chem. B. V. 119. P. 5176–83.

УДК 57.085.25

Новые возможности применения кремниевых наночастиц в биофотонике

***А.В. Скобёлкина*[1], *Ф.В. Кашаев*[1], *Д.В. Шулейко*[1], *А.В. Колчин*[1], *Д.А. Куракина*[2], *А.В. Хилов*[2]**

[1] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
[2] Институт прикладной физики РАН

Кремний является одним из важнейших микроэлементов в организме человека, встречается во многих тканях и органах, таких как легкие, надпочечники, трахеи, кости и связки. Кремниевые наночастицы (КНЧ) активно применяются для диагностики и лечения различных заболеваний, имплантологии, биомолекулярного скрининга [1, 2] благодаря высокой биосовместимости, биодоступности, биодеградируемости и низкого уровня токсичности данного материала [2, 3]. Особую роль для биологического применения играют наночастицы на основе пористого кремния (ПК) [1, 4]. Поры способны вмещать в себя крупные органические молекулы, что может быть использовано для доставки лекарств. Кроме того, в ПК проявляются квантово-размерные эффекты, благодаря которым КНЧ проявляют эффективную фотолюминесцецнию (ФЛ) в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах спектра. Пик ФЛ, как правило, попадает в диагностическое окно прозрачности биотканей (700–1300 нм), что позволяет использовать рассматриваемые КНЧ в качестве ФЛ-маркеров в живых организмах для диагностики различных заболеваний.

В настоящей работе предлагается последовательно использовать методы электрохимического травления (формирование слоев ПК) и пикосекундной лазерной абляции в дистиллированной воде, этаноле и жидком азоте для получения КНЧ. Применение двух данных технологий открывает широкие перспективы по одновременному достижению как эффективных ФЛ и светорассеяния в ансамблях КНЧ, так и малых (менее 20 нм) размеров последних для успешного использования в биофотонике.

Ансамбли наночастиц, сформированных при абляции в этаноле и жидком азоте, проявляют эффективную ФЛ с пиком, попадающим в диагностическое окно прозрачности биоткани (с максимумом 720 нм для случая лазерной абляции в этаноле, 740 нм – в жидком азоте). Также зарегистрировано увеличение более чем на порядок времен затухания ФЛ в аблированных КНЧ (до десятков и сотен микросекунд) по сравнению с исходными пленками ПК за счет уменьшения размеров кремниевых нанокристаллов в результате лазерной абляции. Ввиду относительно малых размеров данных КНЧ (минимальный размер составлял 4 нм) и эффективной ФЛ в диагностическом окне прозрачности биотканей полученные наночастицы могут быть использованы в качестве ФЛ-маркеров при визуализации живых организмов.

Кроме того, методом спектрофотометрии исследованы оптические характеристики суспензий полученных кремниевых наночастиц. Показано, что рассматриваемые суспензии в дистиллированной воде (рис. 1а) и этаноле (рис. 1б) обладают коэффициентами рассеяния света $\mu_a \sim 0.1$ мм$^{-1}$, достаточными для их использования в качестве контрастирующих агентов в методе оптической когерентной томографии (ОКТ). Для рассматриваемых образцов с ростом длины волны наблюдается монотонное уменьшение коэффициента поглощения μ_a в диапазоне длин волн 400–800 нм до близких к нулю значений, начиная с 700 нм. Такое поведение спектральной зависимости связано с уменьшением поглощения кристаллического кремния в красной области спектра. В

спектральном интервале 900–1000 нм наблюдается рост μ_a, обусловленный поглощением жидкости (воды или спирта).

При добавлении КНЧ в фантомы биотканей (агаровый гель) с искусственными неоднородностями, имитирующими кожные поры, благодаря эффективному светорассеянию используемых контрастирующих агентов было зафиксировано существенное увеличение сигнала ОКТ: с 7,7 дБ для агарового геля без частиц до 13,5дБ с частицами мезопористого кремния, аблированными в воде. Таким образом, рассмотренные в нашей работе КНЧ представляют несомненный интерес для дальнейшего их исследования в качестве контрастирующих агентов в ОКТ для визуализации структурных элементов биотканей, включая случаи адресной доставки.

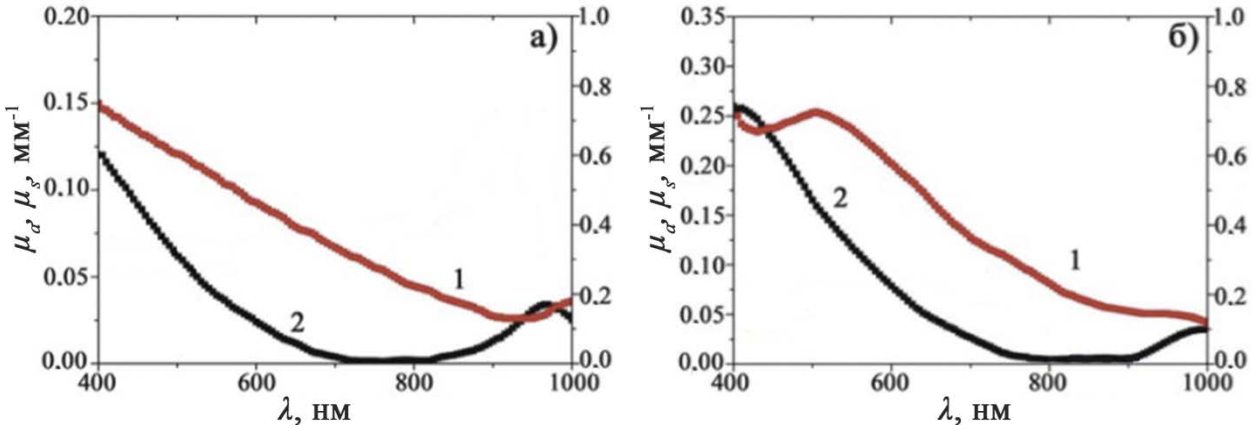


Рис. 1. Спектры коэффициентов рассеяния μ_s – 1 и поглощения μ_a – 2 для образцов мезопористого кремния, аблированного в дистиллированной воде (а) и этаноле (б)

Работа выполнена при финасовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00884 мол_а). Авторы благодарят М.Ю. Кириллина, Л.А. Голованя и С.В. Заботнова за плодотворные обсуждения результатов работы, Д.Е. Преснова – за анализ размеров КНЧ методом растровой электронной микроскопии.

Литература

1. *Kirillin M.Yu., Sergeeva E.A., Agrba P.D.,* [*et al.*] // Laser Physics. 2015. 25. 1 P.
2. *Almeida P.V., Shahbazi M.A., Correia A.* [*et al.*] // Future Medicine. Ltd 2017. 34 P.
3. *Тимошенко В.Ю., Кудрявцев А.А., Осминкина Л.А.* [*и др.*] // Письма в ЖЭТФ. 2006. 83, № 9. 492 С.
4. *Gongalsky M.B., Osminkina L.A., Pereira A.* [*et al.*] // Scientific reports. 2016. 6. 1 P.

УДК 577.352.332

Структурные исследования гомолога глутаматного транспортёра из *Pyrococcus horikoshii*

***Р. Асташкин*[1,2], *К. Ковалёв*[1,2,3,4], *Е. Зиновьев*[1,3], *К. Баекен* [3], *Т. Баландин* [2], *К. Фальке* [5], *В. Горделий*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS, Grenoble, France.
[3]Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Jülich, Jülich, Germany
[4]Institute of Crystallography, University of Aachen (RWTH), Aachen, Germany
[5]Institute of Complex Systems, Zelluläre Biophysik (ICS-4), Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany.

Глутамат — один из наиболее распространённых нейромедиаторов в нервной системе позвоночных. Существует два основных семейства белков, контролирующих транспорт глутамата: транспортеры возбуждающих аминокислот (EAAT) и везикулярные глутаматные транспортеры (VGLUT). EAAT — белки, зависимые от натрия, которые перемещают глутамат из синаптической щели обратно в нейроны и клетки глии[1]. Предполагается, что нарушения в экспрессии или

функционировании этих белков связаны с большим количеством заболеваний: от болезни Альцгеймера до шизофрении[2]. Белок Glt_{Ph} из археи *Pyrococcus horikoshii* имеет 37%-ную гомологию с EAAT и является моделью для исследования EAAT [3]. Существует несколько структур этого белка с разрешением до 2,97 Å [4], полученных с помощью метода кристаллизации *in surfo*. В данной работе мы представляем структуру белка Glt_{Ph} из *Pyrococcus horikoshii* разрешения 2,6 Å, полученную методом кристаллизации *in meso*. Белок был экспрессирован в *E.coli* и кристаллизован в липидной кубической фазе моноолеина. Структура более высокого разрешения открывает возможности для более точной молекулярной динамики для лучшего понимания принципов работы глутаматного транспортера и его важных для медицины мутантов.

Литература

1. *Zerangue N., & Kavanaugh M.P.* Flux coupling in a neuronal glutamate transporter // Nature. 1996. 383(6601). 634.
2. *Kim A.H., Kerchner G.A., & Choi D.W.* (2002). Blocking excitotoxicity. In CNS neuroprotection (pp. 3-36). Springer, Berlin, Heidelberg.
3. *Machtens J.P., Kortzak D., Lansche C., Leinenweber A., Kilian P., Begemann B., ... & Fahlke C.* Mechanisms of anion conduction by coupled glutamate transporters // Cell. 2015. 160(3). 542–553.
4. *Boudker O., Ryan R.M., Yernool D., Shimamoto K., & Gouaux E.* Coupling substrate and ion binding to extracellular gate of a sodium-dependent aspartate transporter // Nature. 2007. 445(7126). 387.

УДК 577.322.4

Экспрессия эукариотической протонной помпы из *L.maculans* в LEXSY и ее структурный и функциональный анализ

***Н. Дмитриева*[1], *О. Волков*[2], *Р. Асташкин*[1,3], *К. Ковалев*[1,2,3,4], *Д. Забельский*[1,2], *В. Горделий*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Jülich
[3]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS
[4]Institute of Crystallography, University of Aachen (RWTH)

Leptosphaeria maculans – повсеместно распространенный патоген семейства грибов, вызывающий фомоз рапса, поражающий культурные и дикорастущие растения семейства крестоцветных и приводящий к потерям урожая семян до 50% [1]. В 2005 году в геноме *L.maculans* был обнаружен ген похожего на бактериородопсин белка, который стал первым микробным родопсином, найденным в грибах. Было показано [2], что родопсин из *Leptosphaeria* (LR) может ковалентно связывать ретиналь и аналогично бактериородопсину может прокачивать протоны против градиента концентрации. Несмотря на интерес к функциональным свойствам LR и возможность использования его в качестве оптогенетического инструмента [3], на данный момент структура белка не была получена.

В данной работе была показана возможность рекомбинантной экспрессии генов полноразмерного (1–313) и укороченного (49–313) LR в клетках *L.tarentolae*. Белок был солюбилизирован в DDM и был очищен с помощью металл-хелатной хроматографии и гель-фильтрации. Выход составил 9 мг/л для укороченной конструкции и 15 мг/л для полноразмерного белка, средний peak ratio (отношение величины пика поглощения на длине волны 280 нм к величине пика поглощения на 540 нм) составил 1,4. Результаты флеш-фотолиза показывают, что очищенный белок имеет схожий с бактериородопсином фотоцикл, что хорошо согласуется с результатами из литературы, полученными для белка, экспрессировавшегося в *P.pastoris* [2,4]. Для экспериментов по прокачке протонов LR был встроен в липосомы POPC:POPS в соответствии с протоколом, описанным в [5]. Несмотря на то, что полноразмерный и укороченный белки имеют одинаковый фотоцикл, было замечено, LR (1–313) в липосомах имеет заметно более высокую эффективность прокачки по сравнению с LR (49–313), что говорит о важности N-концевых аминокислот для функциональной активности белка. Исследование термостабильности подтверждает, что полноразмерный белок более стабилен.

Как укороченная, так и полноразмерная конструкции LR были успешно закристаллизованы *in meso* по протоколу из [6]. Для кристаллов полноразмерного белка была получена дифракция с разрешением 2,2 Å и решена структура белка (ID30B, ESRF). Структура имеет характерную для родопсинов семиспиральную архитектуру с необычно длинной B-C петлей, которая частично стабилизирована N-концом белка, что позволяет говорить о структурном обосновании более высокой стабильности белка.

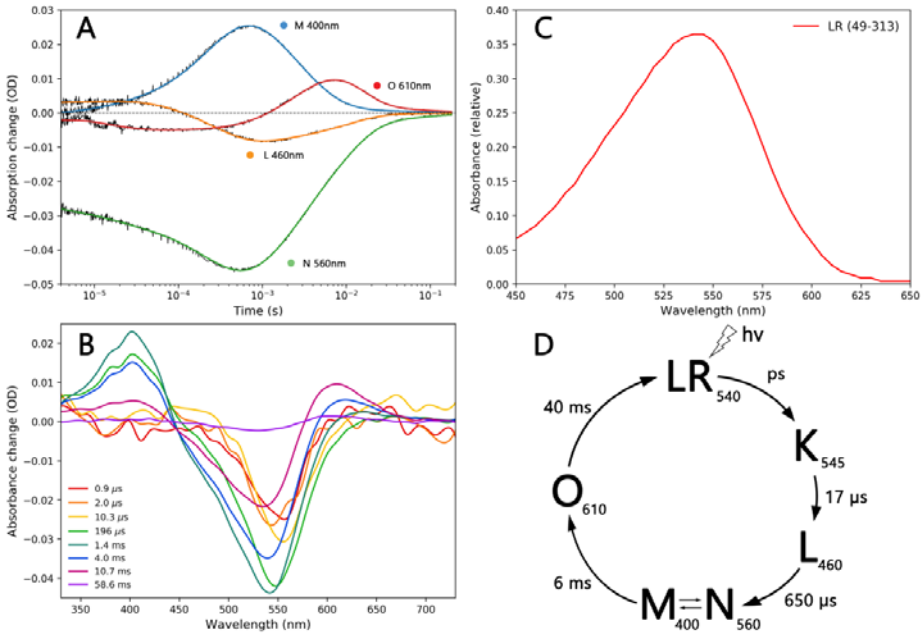


Рис. 1. Результаты флеш-фотолиза для LR(49-313)

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (проект 16-15-00242).

Литература

1. *Robin, A.H.K.* [*et al.*]. Leptosphaeria maculans Alters Glucosinolate Profiles in Blackleg Disease–Resistant and -Susceptible Cabbage Lines // Front. Plant Sci. 2017. 8. 1–15.
2. *Waschuk, S.A., Bezerra, A.G., Shi, L. & Brown, L.S.* Leptosphaeria rhodopsin: Bacteriorhodopsin-like proton pump from a eukaryote //. Proc. Natl. Acad. Sci. 2005. 102. 6879–6883.
3. *Chow, B.Y.* [*et al.*]. High-Performance Genetically Targetable Optical Neural Silencing via Light-Driven Proton Pumps. 2010. 463. 98–102.
4. *Legkun, G., Okhrimenko, I., Chupin, V. & Gordeliy, V.* Membrane protein targeting into mitochondria. Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg. 2016. 1857. e125.
5. *Shevchenko, V.* [*et al.*]. Inward H+pump xenorhodopsin: Mechanism and alternative optogenetic approach // Sci. Adv. 2017. 3. 1–11.
6. *Volkov, O.* [*et al.*]. Structural insights into ion conduction by channelrhodopsin 2 // Science. 2017. (80-.). 358.

УДК 577.322.4

Функциональные и структурные исследования вирусного родопсина OLPVR1.

***Д. Забельский*[1,2], *К. Ковалев*[1,2,3,4], *Т. Баландин*[2], *Д. Братанов*[2], *Р. Асташкин*[1,3], *В. Чупин*[1], *В. Горделий*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Institute of Complex Systems (ICS), ICS-6: Structural Biochemistry, Research Centre Jülich
[3]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS
[4]Institute of Crystallography, University of Aachen (RWTH)

Вирусные родопсины представляют собой подкласс суперсемейства микробных родопсинов, фотоактивных трансмембранных белков, которые вовлечены в биоэнергетические и сигнальные каскады в бактериях и археях [1]. Недавно гены микробных родопсинов были найдены в геноме гигантских вирусов, обитающих в озерах Антарктиды [2]. В этой работе представлена

функциональная и структурная характеризация белка OLPVR1, относящегося к первой группе семейства вирусных родопсинов. Рекомбинантный белок был экспрессирован в *E.coli*, солюбилизирован в DDM и очищен с помощью аффинной хроматографии и гель-фильтрации. Было показано, что вирусные родопсины способны связывать кофактор ретиналь и поглощать свет в видимом диапазоне, а также, будучи встроенными в липосомы, способны прокачивать протоны против градиента концентрации. Кроме того, был определен фотоцикл белка OLPVR1 в нанодисках и подтверждена его стабильность в широком диапазоне pH и температур. Также впервые продемонстрирована структура высокого разрешения OLPVR1 (1,4 Å), полученная методом кристаллизации *in meso*. В работе обсуждаются возможные функции белка OLPVR1, а также применение белка для оптогенетических исследований.

Работа была выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (6.3157.2017/PP)

Литература

1. *Gushchin, I. & Gordeliy, V.* Microbial rhodopsins // Subcellular Biochemistry. 2018. **87**.
2. *Yutin, N. & Koonin, E. V.* Proteorhodopsin genes in giant viruses // Biol. Direct. 2012. **7.** 1–6.

УДК 577.22

Создание мономерных мутантов LOV-домена из термофильных бактерий *Chloroflexus aggregans*

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

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время в молекулярной биологии для наблюдения за динамикой белков в живых клетках широко используют химерные конструкции, состоящие из целевого и флуоресцентного белков. Чаще всего в качестве таких флуоресцентных меток применяют GFP-подобные белки (green fluorescent protein) [1]. Однако у них есть несколько ограничений: их невозможно применять в условиях с низким содержанием кислорода, им необходимо время для созревания хромофора после трансляции, а также у них сравнительно большие размеры (26,9 кДа) [2, 3].

Недавно нами был описан малый термостабильный флавин-связывающий флуоресцентный белок CagFbFP (12,4 кДа), полученный из растворимой гистидин-киназы из термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans* [4]. Выяснилось, что он проявляет высокую стабильность в широком диапазоне условий (при различных температурах, pH, концентрациях мочевины).

Однако исследование с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS) указало на то, что этот белок в растворе образует димеры. Это может повлиять на корректность экспериментов с ним как с флуоресцентной меткой *in vivo.* Для разработки его мономерной модификации мы проанализировали кристаллографическую структуру высокого разрешения, полученную ранее, и создали несколько мутантов. Они были экспрессированы, очищены и проверены с помощью эксклюзионной хроматографии, малоуглового рентгеновского рассеяния и измерения флуоресценции в зависимости от температуры.

Литература

1. *Specht E.A., Braselmann E., and Palmer A.E.* A critical and comparative review of fluorescent tools for live-cell imaging // Annual review of physiology. 2017. 79. 93–117.
2. *Tsien, Roger Y* . The green fluorescent protein // 1998. 509–544
3. *Drepper, Thomas,* [*et al*.]. Reporter proteins for in vivo fluorescence without oxygen // Nature biotechnology. 2007. 25.4. 443.
4. *Hanada, Satoshi,* [*et al*.]. Chloroflexus aggregans sp. nov., a filamentous phototrophic bacterium which forms dense cell aggregates by active gliding movement // International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology. 1995. 45.4. 676–681. 3.

УДК 577.24

Исследование воздействия антиоксидантов на длину теломер

***У.З. Маймеков*[1], *Н.С. Ильинский*[1], *В.И. Горделий*[1-3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт структурной биологии, Гренобль, Франция
[3]Институт сложных систем, Исследовательский центр Юлиха, Юлих, Германия

Теломеры – это область повторяющейся последовательности нуклеотидов (TTAGGG) на концах хромосом. Каждое деление клетки приводит к укорачиванию теломер. Таким образом, длина теломер определяет “возраст” клетки, чем короче теломеры, тем «старее» клетка. На данный момент известны несколько методов измерения длин теломер: qPCR, TRF, STELA, Telomapping, Q-FISH and Flow FISH.

Одной из причин укорачивания теломер являются повреждения ДНК, вызванные активными формами кислорода (АФК). Для предотвращения повреждений теломерной ДНК от АФК используются митохондриальные антиоксиданты. За счёт отдачи недостающих электронов свободным радикалам, в том числе и АФК, антиоксиданты ингибируют окисление содержимого клеток.

В нашей работе исследуется влияние антиоксидантов SkQ и MitoQ на длину теломер, измеряемой методами Flow FISH и Q-FISH. В методе Flow-FISH используются ПНК зонды, с которыми связана молекула флюоресцеина. ПНК зонды комплементарны теломерной последовательности. Метод основан на сравнении флуоресценции исследуемых и контрольных клеток. Чтобы отличить клетки, используется краситель TO-PRO3. Данные о флуоресценции снимаются на проточном цитофлуориметре. Флуоресценция в спектральной области флюоресцеина (канал BL1) используется для вычисления относительной длины теломер (RTL):

$$RTL = 2 \cdot \frac{\text{fluorescence of sample cells with probe} - \text{fluorescence of sample cells without probe}}{\text{fluorescence of control cells with probe} - \text{fluorescence of control cells without probe}} \cdot 100\% \qquad (1)$$

В отличие от метода Flow-FISH, метод Q-FISH позволяет определить процент коротких теломер, а не среднюю по клетке длину теломер. Известно, что присутствие коротких теломер является критичным для выживания клетки, даже если средняя длина теломер остаётся нормальной.

Измерения методом Q-FISH проводятся на флуоресцентном микроскопе, используя также ПНК зонды. Полученные с микроскопа изображения теломер анализируются с помощью программы Fiji (3D Object Counter plugin). Для каждой клетки строятся гистограммы частоты встречаемости теломер определённой длины (высчитываемой по интенсивности флюоресценции). Отсюда можно определить процент коротких теломер (<3 kbp) в одной клетке. Собрав статистику по всем клеткам, можно выяснить, каков процент молодых и старых клеток.

В планах работы определить, насколько антиоксиданты могут замедлить процесс ускоренного укорачивания теломер при окислительном стрессе. Также будет проверено влияние антиоксидантов на целостность митохондриальной сети.

Литература

1. *Hemann M.T.* [*et al.*]. The shortest telomere, not average telomere length, is critical for cell viability and chromosome stability // Cell. 2001. V. 107. N 1. P. 67–77.
2. *Vera E., Blasco M.A.* Beyond average: potential for measurement of short telomeres //Aging (Albany NY). 2012. V. 4. N 6. P. 379.

УДК 577.322.7

Влияние гуанидин гидрохлорида на фотоцикл бактериородопсина

***А.И. Куклин*[1,2], *А.В. Власов*[2,3], *Ю.Л. Рижиков*[2], *И.В.Чижов*[4], *Д.В.Соловьев*[1,2], *Н.А. Денчер*[2], *Т. Хаусс*[4], *А.Д. Туган-Барановская*[1], *Ж. Тейксера*[5], *Л.С. Ягужинский*[6], *Г. Бюльдт*[2], *В.И. Горделий*[1,8,9]**

[1]Объединенный институт ядерных исследований
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Institute of Crystallography, RWTH Aachen Universit
[4]Institute for Biophysical Chemistry
[5]H-Z Berlin für Materialien und Energie, Macromolecular Crystallography
[6]Laboratoire Léon Brillouin (CNRS/CEA), CEA Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette
[7]Институт Физико-Химической биологии имени А.Н. Белозерского МГУ
[8]Institut de Biologie Structurale, J.-P. Ebel, Université Grenoble Alpes-CEA-CNRS
[9]Institute of Complex System (ICS-6)

Основой функционирования мембранных белков являются конформационные изменения. Мы исследовали конформационные изменения фоточувствительного мембранного белка бактериородопсина в пурпурных мембранах. Фотоиндуцированные конформационные изменения возникают при переходе бактериородопсина в промежуточное М-состояние фотоцикла и были измерены с помощью дифракции электронов [1], нейтронной [2] и рентгеновской [3,4] дифракции.

Ранее мы обнаружили значительное изменение толщины пурпурных мембран (адаптированных к темноте: T = 50,3 Å и к свету: T = 44,7 Å) методом малоуглового рассеяния нейтронов (установка ЮМО, ИБР-2, ОИЯИ, Дубна, Россия) [5] и исследовали растворы пурпурных мембран с гуанидин гидрохлоридом с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния [6] (Ригаку, МФТИ, Долгопрудный, Россия).

Были проведены исследования с помощью флэш-фотолиза для раствора пурпурных мембран с массовой долей 2 % в буфере 100 мМ гуанидин гидрохлорида, 50 mM Na_2CO_3, pH 9,6. На основе временной зависимости оптической плотности на длинах волн 400 и 570 нм показано, что наблюдается нетривиальная кинетика фотоцикла: появилось два разных М-состояния бактериородопсина, а время жизни одного из них увеличилось на 3 порядка (от 10 мс до 10 с).

Литература

1. *Glaeser, R. M., Baldwin, J., Ceska, T. A., Henderson, R.* Electron diffraction analysis of the M412 intermediate of bacteriorhodopsin // Biophys. J. 1986. V 50. P. 913–920.
2. *Dencher, N. A., Dresselhaus, D., Zaccai, G., Büldt, G.* Structural changes in bacteriorhodopsin during proton translocation revealed by neutron diffraction // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 1989. V. 86. P. 7876–7879.
3. *Koch, M. H., Dencher N. A., Oesterhelt D., Plöhn H. J., Rapp G., Büldt G.* // Time-resolved X-ray diffraction study of structural changes associated with the photocycle of bacteriorhodopsin. // EMBO J. 1991. V. 10. P. 521–526.
4. *Dencher N. A., Heberle J., Bark C., Mlchel H., Koch J., Rapp G., Oesterhelt D., Bartels K., Büldt G.* Proton translocation and conformational changes during the bacteriorhodopsin photocycle: Time-resolved studies with membrane-bound optical probes and X-ray diffraction // Photochem. Photobiol. 1991. V. 54. P. 881–887.
5. *Kuklin, A. I., Islamov, A. K., Gordeliy, V. I.* Scientific Reviews: Two-Detector System for Small-Angle Neutron Scattering Instrument // Neutron News. 2005. V. 16. P. 16–18.
6. *Murugova, T. N., Vlasov A.V., Ivankov O.I., Rogachev A.V., Ryzhykau Yu.L., Soloviov D.V., Zhigunov A., Zinovev E.V., Kovalev Yu.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. V. 17. P. 1397–1402.

УДК 577.322.7

Структура модульных нанотранспортёров, полученная методом малоуглового рентгеновского рассеяния

***А.Д. Власова*[1], *Ю.В. Храмцов*[2], *А.В. Власов*[1,3], *А.И. Куклин*[1,4], *В.И. Горделий*[1,5,6], *А.С. Соболев*[2,7]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт биологии гена РАН
[3]Institute of Crystallography, RWTH Aachen University
[4]Объединённый институт ядерных исследований
[5]Institut de Biologie Structurale, J.-P. Ebel, Université Grenoble Alpes-CEA-CNRS, Grenoble, F-38000
[6] Institute of Complex Systems: Structural Biochemistry (ICS-6), Research Centre Jülich, Jülich, 52425
[7]Московский государственный университет им. Ломоносова

Модульные нанотранспортёры (МНТ) представляют собой химерные белковые молекулы, которые могут быть использованы для доставки фотосенсибилизаторов, радиоизотопов и др. лекарств в ядра раковых клеток [1]. Молекула МНТ состоит из нескольких модулей, каждый из которых обеспечивает определённый этап доставки [2]. Лигандный модуль взаимодействует с рецептором на поверхности клетки-мишени, далее в процессе рецептор-опосредованного эндоцитоза молекулы МНТ оказываются в эндосомном компартменте. В эндосомах под действием снижения pH активируется эндосомолитический модуль, который обеспечивает выход молекул МНТ в цитозоль. В цитозоле сигнал ядерной локализации в составе МНТ взаимодействует с импортинами и обеспечивает транспорт молекул МНТ в ядро. До сих пор не было информации о точной трехмерной структуре молекулы МНТ.

В данной работе при помощи метода малоуглового рентгеновского рассеяния, сопряжённого с гельфильтрацией [3], получена структура молекулы МНТ низкого разрешения (Rg = 3,7 и 3,9 нм для МНТ-αMSH (МНТ с α-меланоцитстимулирующим гормоном в качестве лигандного модуля) и МНТ-EGF (с эпидермальным фактором роста) соответственно). Для получения структуры использовалась программа Dammin (из программного пакета ATSAS [4]). Исследование полученной структуры позволяет предположить, что N- и C-концы молекулы удалены друг от друга, что позволяет модулям не нарушать функциональную активность друг друга. Полученная в данной работе информация о структуре МНТ важна для дальнейшего усовершенствования МНТ и последующего внедрения их в клиническую практику.

Литература

1. *Gilyazova D.G.* [*et al.*]. Targeting cancer cells by novel engineered modular transporters // Cancer Res. 2006, 66(21):10534-10540.
2. *Slastnikova T.A.* [*et al.*]. Modular nanotransporters: a versatile approach for enhancing nuclear delivery and cytotoxicity of Auger electron-emitting 125I // EJNMMI Res. 2012. 2(1):59.
3. *Brennich, M.E* [*et al.*]. Online Size-exclusion and Ion-exchange Chromatography on a SAXS Beamline // J Vis Exp. 2017; (119).
4. *Franke D.* [*et al.*]. ATSAS 2.8: a comprehensive data analysis suite for small-angle scattering from macromolecular solutions // J Appl Crystallogr. 2017. 50(Pt 4):1212–1225.

УДК 53.088.7

Деконволюция данных, полученных с помощью установки малоуглового рентгеновского рассеяния Rigaku

***А.С. Казанцев*[1], *Ю.Л. Рижиков*[1], *А.И. Куклин*[1,2]**

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

Одним из методов исследования биологических объектов и определения их структуры низкого разрешения является метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Точность определения структуры зависит от качества полученных с детектора данных интенсивности в

зависимости от модуля вектора рассеяния. На точность данных влияют такие факторы, как линейная ширина и угловая расходимость пучка, размер пикселя на детекторе, расстояние образец-детектор, размер детектора, толщина образца. Перечисленные факторы вызывают размытие картины рассеяния. Можно с некоторой точностью описать это как свёртку идеальной искомой картины рассеяния с «функцией рассеяния точки» (англ. point spread function, PSF).

В силу теоремы о свёртке, определив PSF исходя из параметров установки, можно провести обратный свёртке процесс – деконволюцию, вычислив идеальную картину рассеяния как фурье-образ частного фурье-образов экспериментальной картины рассеяния и PSF. На практике такая процедура затруднена наличием шумов в экспериментальных данных – деконволюция увеличивает детализацию картины рассеяния, увеличивая зашумлённость данных. Для преодоления проблемы зашумлённости данных существуют методы регуляризации деконволюции, такие как фильтр высоких частот, регуляризация по Тихонову и др. [1].

В данной работе было реализовано проведение деконволюции в случае обработки данных, полученных на установке МУРР Rigaku (МФТИ, Долгопрудный, Россия) [2]. Проверка производилась на примере данных рассеяния от порошка бегената серебра (AgBh), полученных при различных расстояниях образец-детектор, которым соответствуют различные PSF. Картина рассеяния данного образца содержит дифракционные кольца (рис. 1). По их ширинам можно количественно анализировать, верно ли учтены факторы уширения, формирующие PSF.

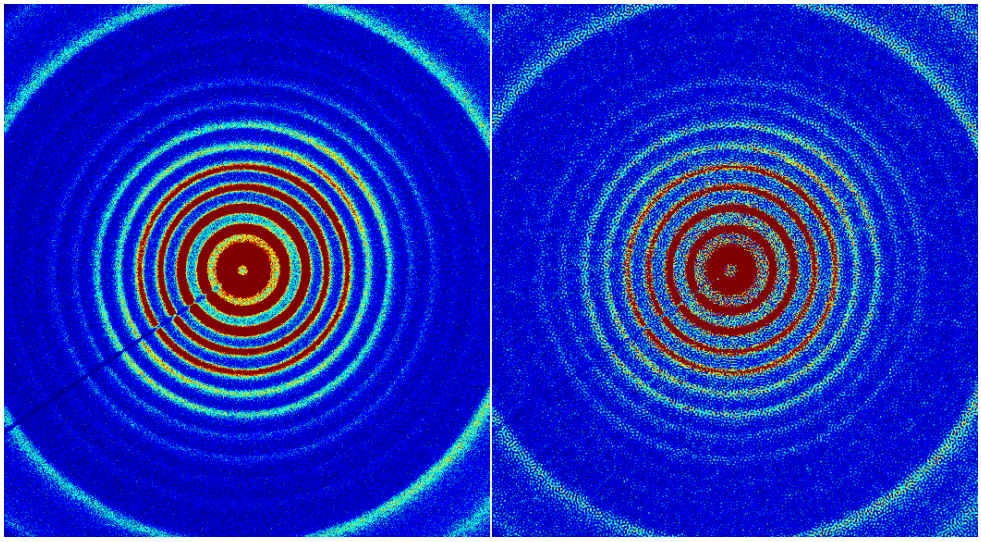


Рис. 1. Пример дифракционной картины интенсивности для AgBh. Слева – исходные данные, справа – результат деконволюции для модельной PSF при уменьшения шума посредством фильтра высоких частот

Литература

1. *Xu L., SJ. Ren J., Liu C., Jia J.* Deep Convolutional Neural Network for Image Deconvolution // URL: https://papers.nips.cc/paper/5485-deep-convolutional-neural-network-for-image-deconvolution.pdf
2. *Murugova T.* [*et al.*]. Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. 2015. V. 17. P. 1397–1402.

УДК 535.354

Метод DLW-фотолитографии для исследования свойств биологических объектов

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

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В последние годы большую популярность приобретают методы создания микро- и нано-размерных объектов, открывающие недоступные ранее возможности исследований в различных областях современной науки. Одним из таких методов является метод прямой лазерной печати (DLW – Direct Laser Writing), позволяющий создавать трехмерные объекты различной сложной геометрии с хорошим качеством. В данной работе рассмотрены некоторые биологические

применения данной технологии. В частности, речь пойдет о дихроических круговых поляризаторах, помогающих различать энтиоморфные конфигурации объектов, таких как D- и L- изомеры, которые проявляют эффект кругового дихроизма различного знака. Другим актуальным применением метода DLW литографии является печать клеточных каркасов (т.н. scaffolds), позволяющих изучать поведение раковых и других клеток в трехмерных средах, а также контролировать их морфологию, дифференциацию и другие свойства с помощью изменения геометрии каркаса [1].

В основе метода прямого лазерного письма лежит явление двухфотонной полимеризации светочувствительного фоторезиста, в состав которого входят специально подобранные фотоинициатор и олигомер. С помощью двухфотонного поглощения излучения фемтосекундного лазера осуществляется возбуждение молекул фотоинициатора, которые затем релаксируют в триплетное состояние, способствуя образованию в дальнейшем свободных радикалов. Молекулы олигомера присоединяются к этим радикалам, создавая длинную полимерную цепь. Также в настоящий момент проводится активная работа по улучшению метода DLW с помощью технологии STED (STimulated Emission Depletion), основанной на использовании второго лазера гашения с определенным профилем излучения (в виде тора, с провалом интенсивности в центре), что позволяет существенно увеличить разрешение печати [2].

В данной работе представлен упорядоченный массив спиралей и другие структуры, созданные методом DLW-литографии на установке «Nanoscribe Photonics», а также на разрабатываемом в лаборатории технологий 3D-печати функциональных микроструктур STED-DLW-нанолитографе. Параметры и морфология полученных образцов изучены методами электронной микроскопии. Рассмотрены перспективы дальнейшего использования полученных структур для изучения свойств хиральных биологических объектов (таких как молекулы ДНК, сахара, ферменты), а также для исследования поведения клеток в специально созданных полимерных средах.

Технологическая часть работы выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-01051 и госзадания № 16.11575.2018/10.11., возможность проведения тонких оптических измерений дал грант РФФИ № 17-02-01408.

Литература

1. *Greiner A., Richter B., Bastmeyer M.* Micro-engineered 3D scaffolds for cell culture studies // Macromol. Biosci. 2012. 12. 1301–1314.
2. *Chubich D. A., Kolymagin D. A., Kazakov I. A., Vitukhnovsky A. G.* Morphology and Structural Parameters of Three-Dimensional Structures Created Using STED Nanolithography // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2018. V. 82. N 8, P. 1012–1017.

УДК 577.322.54

Верификация структуры тримера димеров комплекса NpSRII/HtrII с помощью метода малоуглового рассеяния

***Ю.Л. Рижиков*[1], *М.И. Рулёв*[1,2,3], *Д.В. Забельский*[1,4], *М.Ю. Николаев*[1,5], *Т.Н. Муругова*[1,3], *М. Солер-Лопес*[2], *А.И. Куклин*[1,3], *М. Энгельхард*[6], *В.И. Горделий*[1,4,7]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный уриверситет)
[2]European Synchrotron Radiation Facility
[3]Объединённый институт ядерных исследований
[4]Institute of Complex Systems (ICS-6)
[5]École Polytechnique Fédérale de Lausanne
[6]Max Planck Institute of Molecular Physiology
[7]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Комплекс сенсорного родопсина II с его трансдюсером (NpSRII/HtrII) из бактерий *Natronomonas Pharaonis* является представителем фоторецепторов архебактерий, который наряду с хеморецепторами и сенсор гистидин киназами образует класс двухкомпонентных сигнальных систем, который является наиболее распространённым типом сигнальных систем в архебактериях. Комплекс сенсорного родопсина II с трансдюсером широко используется как модельная система

для изучения механизмов передачи сигнала посредством двухкомпонентных белковых сигнальных систем через клеточную мембрану. Известна структура трансмембранного домена NpSRII/HtrII$_{83}$ в нескольких состояниях (коды PDB: 1H2S и 4GYC) [1,2], но неизвестна структура полноразмерного комплекса, что не позволяет понять молекулярные механизмы передачи сигнала.

NpSRII/HtrII имеет 4 домена (см. рис. 1): трансмембранный домен, который включает в себя сенсорный родопсин II and 1-83 аминокислотные остатки трансдюсера, два HAMP домена – HAMP1 и HAMP2 (аминокислоты 84–137 и 157–213 трансдюсера соответственно), и домен метилирования и передачи сигнала (237–534 аминокислоты трансдюсера), или киназный домен [3]. Комплекс функционирует в виде димера [1]. Димеры, в свою очередь, образуют тримеры димеров в клеточной мембране [4–6]. В литературе предложены два возможных варианта межбелковых контактов, которые соответствуют так называемым «O» и «Y» конформациям [4, 5] (см. рис. 2).

В данной работе методом малоуглового рассеяния исследовалась структура низкого разрешения полноразмерного комплекса NpSRII/HtrII. Измерения проводились на установке малоуглового рентгеновского рассеяния BM29 (ESRF) [7]. Обработка данных проводилась с помощью программного пакета ATSAS [8].

В предположении P3 симметрии получена *ab initio* структура тримера димеров полноразмерного комплекса NpSRII/HtrII. Вычисленный размер комплекса в направлении по нормали к мембране составляет 320 ÷ 350 Å, что хорошо согласуется с данными литературы [3]. Полученная структура имеет вытянутую форму с соотношением длины к ширине ~5:1. Она имеет характерную полость вдоль центральной оси, что указывает на «O»–конформацию тримера димеров. Также структура содержит предполагаемые области контактов димеров трансдюсера, которые расположены в начале и в конце киназного домена, придавая устойчивость тримерной конструкции.

Настоящая работа даёт ключевое понимание упорядочения и взаимодействия доменов полноразмерного комплекса NpSRII/HtrII. Это будет способствовать пониманию механизмов распространения сигнала в двухкомпонентных белковых сигнальных системах.

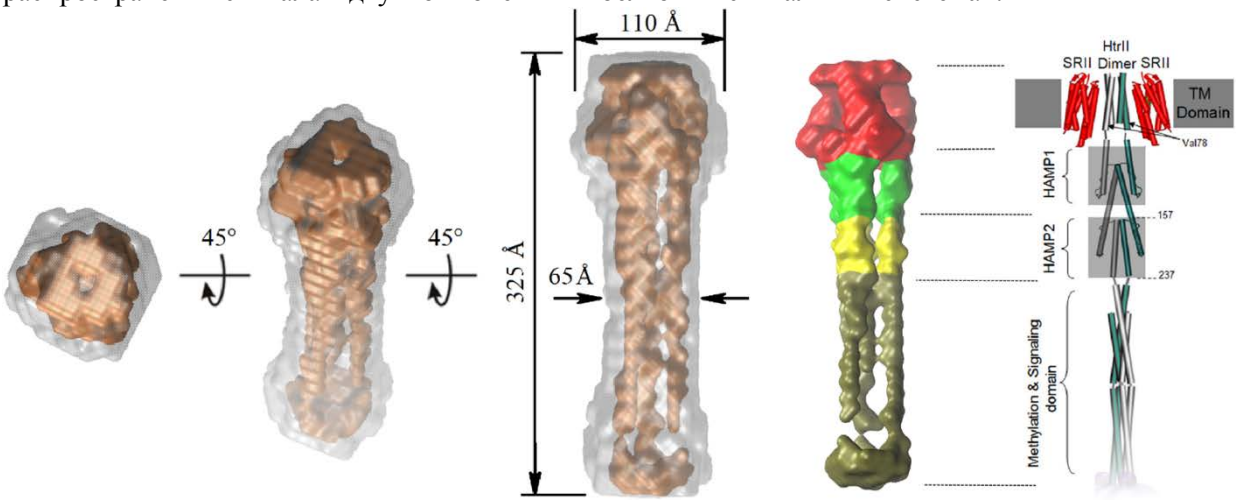


Рис. 1. Слева – три проекции полученной *ab initio* модели тримера димеров комплекса NpSRII/NpHtrII. Справа – сравнение *ab initio* модели и схемы расположения доменов из работы [3]. Предполагаемые позиции трансмембранного домена, доменов HAMP1 и HAMP2 и киназного домена отмечены красным, зелёным, жёлтым и коричневым цветами соответственно

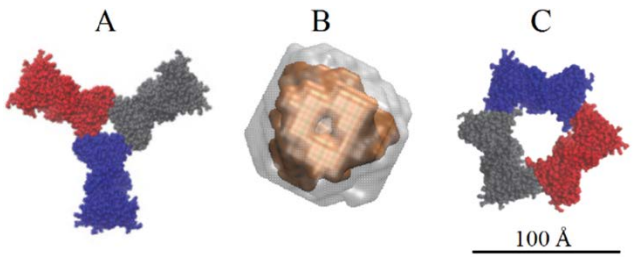


Рис. 2. A – "Y"-конформация тримера димеров NpSRII/HtrII. B – *ab initio* структура NpSRII/HtrII (вид сверху). C – "O"-конформация тримера димеров комплекса. Изображения A и C взяты из работы [4]

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект №16-15-00242).

Литература

1. *Gordeliy V.I.* [*et al.*]. Molecular basis of transmembrane signalling by sensory rhodopsin II–transducer complex // Nature. 2002. V. 419. P. 484–487.
2. *Ishchenko A.* [*et al.*]. New Insights on Signal Propagation by Sensory Rhodopsin II/Transducer Complex // Sci. Rep. 2017. V. 7. Art. 41811. P. 1-10.
3. *Wang J.* [*et al.*]. HAMP Domain Signal Relay Mechanism in a Sensory Rhodopsin-Transducer Complex // J Biol Chem. 2012. V. 287, N 25. P. 21316–21325.
4. *Orekhov P.S.* Signaling and Adaptation in Prokaryotic Receptors as Studied by Means of Molecular Dynamics Simulations // PhD thesis. 2016.
5. *Orekhov P.S.* [*et al.*]. Sensory Rhodopsin I and Sensory Rhodopsin II Form Trimers of Dimers in Complex with their Cognate Transducers // Photochem. Photobiol. 2017. V. 93. P. 796–804.
6. *Ryzhykau Y.L.* [*et al.*]. Trimers of dimers of SRII/HtrII full complex. Small angle scattering structural investigation // FEBS J. 2017. V. 284. P. 154.
7. *Pernot P.* [*et al.*]. Upgraded ESRF BM29 beamline for SAXS on macromolecules in solution // J. Synchrotron Radiat. 2013. V. 20. P. 660–664.
8. *Petoukhov M.V.* [*et al.*]. New developments in the ATSAS program package for small-angle scattering data analysis // J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 342–350.

УДК 57.023

Изучение внутриклеточной локализации мономеров Аβ 1-42 методами современной флуоресцентной микроскопии

***Е.Я. Подоляк*[1], *И.С. Охрименко*[1], *И.В. Маслов*[1], *В.И. Борщевский*[1], *Н.А. Денчер*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Дармштадтский технический университет

Долгое время считалось, что ключевым событием в развитии болезни Альцгеймера является накопление фибриллярного амилоида (fAβ) во внеклеточном пространстве. Хотя эта гипотеза по-прежнему пользуется поддержкой некоторых исследователей, все больше данных указывает на нейротоксичность мономерных форм Аβ (и/или малых олигомеров, растворимых форм – sAβ). Внутриклеточное накопление sAβ предшествует возникновению амилоидных бляшек и нейрофибриллярных клубков у людей и животных моделей болезни Альцгеймера [1–3], являясь таким образом одним из самых ранних событий в развитии патологии. Внутриклеточный пул sAβ имеет двойное происхождение: помимо того, что Аβ образуется из белка предшественника амилоида (APP) на внутриклеточных мембранах, клетки способны поглощать ранее секретируемый Аβ из внеклеточного пространства [4]. Были описаны некоторые механизмы, участвующие в интернализации sAβ различными типами клеток головного мозга, а также последствия его поглощения [6–9]. Однако точный механизм поглощения sAβ нейронами все еще остается неясным.

В данной работе флуоресцентно меченный $Aβ_{1-42}$ был дезагрегирован с образованием мономеров/небольших олигомеров в соответствии с отработанным в лаборатории протоколом [5] и добавлялся непосредственно в питательную среду клеток линии нейробластомы человека (SH-SY5Y) и олигодендроглии крысы (OLN-93). С помощью флуоресцентной конфокальной микроскопии в режиме реального времени был отслежен путь sAβ из внеклеточного пространства к внутриклеточным мишеням. С помощью цитофлуориметрического анализа была оценена доля пораженных амилоидом клеток, а также кинетика взаимодействия sAβ с клетками. Таким образом были проанализированы динамика поглощения sAβ разными типами клеток мозга и колокализация sAβ с различными органеллами (митохондриями, лизосомами, ЭПР) и плазматической мембраной клеток.

Литература

1. *Gouras, G.K.* [*et al*.]. Intraneuronal Abeta42 accumulation in human brain // Am. J. Pathol. 2000. 156. 15–20.
2. *Bayer, T.A. & Wirths, O*. Intracellular accumulation of amyloid-Beta - a predictor for synaptic dysfunction and neuron loss in Alzheimer's disease // Front. Aging Neurosci. 2010. 2. 8.
3. *Fernández-Vizarra, P.* [*et al*.]. Intra- and extracellular Abeta and PHF in clinically evaluated cases of

Alzheimer's disease // Histol. Histopathol. 2004. 19. 823–44.
4. *LaFerla, F.M., Green, K.N. & Oddo, S.* Intracellular amyloid-β in Alzheimer's disease // Nat. Rev. Neurosci. 2007. 8. 499–509.
5. *Džinić, T. & Dencher, N.A.* Oxygen Concentration and Oxidative Stress Modulate the Influence of Alzheimer's Disease A β 1–42 Peptide on Human Cells. 2018.
6. *Mohamed, A. & Posse De Chaves, E.* Aβ Internalization by Neurons and Glia // SAGE-Hindawi Access to Res. Int. J. Alzheimer's Dis. 2011.
7. *Nagele R., D'Andrea M., Anderson W. & Wang H.-Y.* Intracellular accumulation of β-amyloid1–42 in neurons is facilitated by the α7 nicotinic acetylcholine receptor in Alzheimer's disease // Neuroscience. 2002. 110. 199–211.
8. *Mandrekar S.* [*et al.*]. Microglia Mediate the Clearance of Soluble A through Fluid Phase Macropinocytosis // J. Neurosci. 2009.
9. *Snyder E.M.* [*et al.*]. Regulation of NMDA receptor trafficking by amyloid-β // Nat. Neurosci. 2005. 8. 1051–1058.

УДК 577.29

Успешное определение структуры рецептора, сопряжённого с G-белком, при помощи лазера на свободных электронах PAL XFEL

***Е. Марьин*[1], *А. Гусач*[1], *А. Лугинина*[1], *К. Ковалёв*[1,2], *А. Мишин*[1], *В. Борщевский*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Forschungszentrum Julich, Julich, Germany

Мембранные белки играют важную роль в передаче сигнала через клеточную мембрану во многих организмах [1–3]. В последнее время их структурные исследования стали более доступны благодаря прогрессу в их экспрессии, стабилизации и кристаллизации, наравне с вычислительными методами предсказания их стабильности, ускоряющими упомянутые шаги [4]. За прошедшее десятилетие, серийная фемтосекундная кристаллография (СФК) с использованием рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ) позволила определить структуры ранее труднодоступных структур [5] рецепторов, сопряжённых с G-белком (GPCR), открывая путь к рациональному дизайну лекарств и пониманию механизма активации GPCR [6]. Однако на данный момент только пять РЛСЭ доступны для экспериментов по СФК, среди которых, по нашим сведениям, только три на данный момент доложили об успешном решении структуры белка, включая недавно опубликованные структуры с Европейского РЛСЭ [7]. В нашей работе мы докладываем о первом, по нашей информации, успешном определении структуры GPCR на установке NXI на PAL (Пхохан, Южная Корея) [8]. Данные были собраны при частоте лазера в 30 Гц менее чем за 12 часов при доставке образца при помощи инжектора липидной кубической фазы [9]. Разрешение получившегося набора данных составило 2,5 ангстрем. Данная работа показывает возможности PAL при проведении экспериментов по определению структуры при помощи СФК.

Литература

1. *Gushchin I., Gordeliy V.* Microbial Rhodopsins // Sub-cellular biochemistry. , 2018. P. 19–56.
2. *Gushchin I.* [*и др.*] Mechanism of transmembrane signaling by sensor histidine kinases // Science. 2017. V. 356. N 6342. P. eaah6345.
3. *Volkov O.* [*и др.*] Structural insights into ion conduction by channelrhodopsin 2 // Science. 2017. V. 358. N 6366. P. eaan8862.
4. *Popov P.* [*и др.*] Computational design of thermostabilizing point mutations for G protein-coupled receptors.
5. *Katritch V., Cherezov V., Stevens R.C.* Structure-Function of the G Protein–Coupled Receptor Superfamily // Annu. Rev. Pharmacol. Toxicol. 2013. V. 53. N 1. P. 531–556.
6. *Stauch B., Cherezov V.* Serial Femtosecond Crystallography of G Protein–Coupled Receptors // 2018. N March. P. 1–21.
7. *Park J.* [*и др.*] Current status of the CXI beamline at the PAL-XFEL // J. Korean Phys. Soc. 2016. V. 69. N 6. P. 1089–1093.
8. *Weierstall U.* Liquid sample delivery techniques for serial femtosecond crystallography // Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci. 2014. V. 369. N 1647. P. 20130337.
9. *Grünbein M.L.* [*и др.*] Megahertz data collection from protein microcrystals at an X-ray free-electron laser // Nat. Commun. 2018. V. 9. N 1. P. 3487.

УДК 577.345

Оценка качества, оптимизация и автоматизация реконструкции изображений сверхвысокого разрешения

***А.С. Максимов*[1], *K. Douglass*[2], *C. Sieben*[2], *P. Rolland*[2], *V. Cevher*[2], *S. Manley*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland

Микроскопия сверхвысокого разрешения в последнее время переживает бурный рост, но большинство связанных с ней техник используют специальное и зачастую дорогостоящее оборудование. Однако существуют и чисто вычислительные способы улучшить разрешающую способность обыкновенного широкопольного микроскопа, один из которых, SRRF (англ. Super-Resolution Radial Fluctuations) [1], и был рассмотрен в данной работе.

Преимущество этого алгоритма состоит в возможности менять его параметры, как и параметры получения изображений микроскопом, без участия человека. Это позволяет автоматизировать весь процесс измерений и избегать неверных выводов о структуре образца, получая наиболее качественные изображения. Разработка протокола такой автоматизации, представленного на рис. 1, и была поставлена одной из основных целей данной работы. Его этапы:

1) *получение изображений* – автоматизировано с помощью API программы управления микроскопом μManager на языке Python;
2) *реконструкция* – проводилась с использованием плагина NanoJ-SRRF к программе FIJI-ImageJ при фиксированных его параметрах (их оптимизация планируется в будущем);
3) *оценка качества* – основными критериями были выбраны разрешение изображения и количество появившихся после реконструкции артефактов – структур, которые не были представлены в образце, и других неточностей;
   a) разрешение оценивалось с помощью метода FRC (англ. Fourier Ring Correlation) [2];
   b) среднее количество артефактов на изображении было оценено с помощью плагина ImageJ NanoJ-SQUIRREL [3].
4) *оптимизация* – осуществлялась программой из библиотеки байесовской оптимизации на языке Python [4, 5]; целевая функция – нормализованная сумма разрешения и количества артефактов.

Для характеризации работы SRRF и проверки построенного протокола были созданы скрипты для ImageJ и μManager и проведены симуляции и измерения флуоресценции в фиксированных и живых клетках. Осуществлены два типа измерений и оценки качества реконструкции на одном поле зрения:

- длительный – при одном наборе параметров в течение длительного периода времени; позволяет по выходу характеристик на плато понять время, в течение которого образец обесцвечивается, что даёт максимальное время оптимизации параметров, а это особенно важно при использовании биологических образцов;
- сеточный – на сетке параметров экспозиция-мощность лазера; позволяет оценить адекватность подхода, соотнося полученные характеристики и качество «на глаз».

Применение «длительного» подхода: два графика на рис. 2 слева показывают, что, время и характер выцветания двух образцов различаются. Карта справа, полученная на данном этапе в ручном режиме запуска частей протокола, показывает, что алгоритм действительно обходит всю область параметров, на каждом шагу выбирая предположительно наиболее информативную точку.

Полученные «сеточным» подходом карты и соответствующие им реконструкции на рис. 3 позволяют понять, что в целом оценка качества адекватна: нужны как можно меньшие величины разрешения и количества артефактов. При этом из сравнения реконструкций под номерами 2 и 5 сверху видно, что разрешение играет бóльшую роль и недооценено при использовании данной целевой функции. Это оставляет открытым вопрос определения этой функции и поиска других, более точных способов оценки качества реконструкции.

В перспективе построенный в данной работе метод позволит автоматизировать весь процесс реконструкции избражений сверхвысокого разрешения с одновременным улучшением их качества.

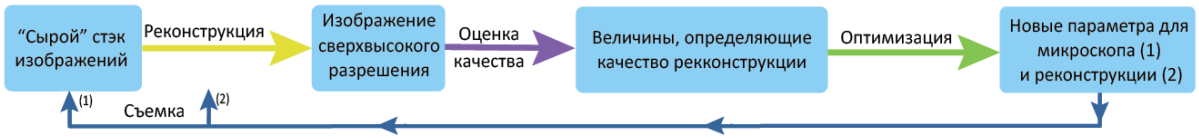


Рис.1. Протокол автоматизации получения и реконструкции изображений сверхвысокого разрешения

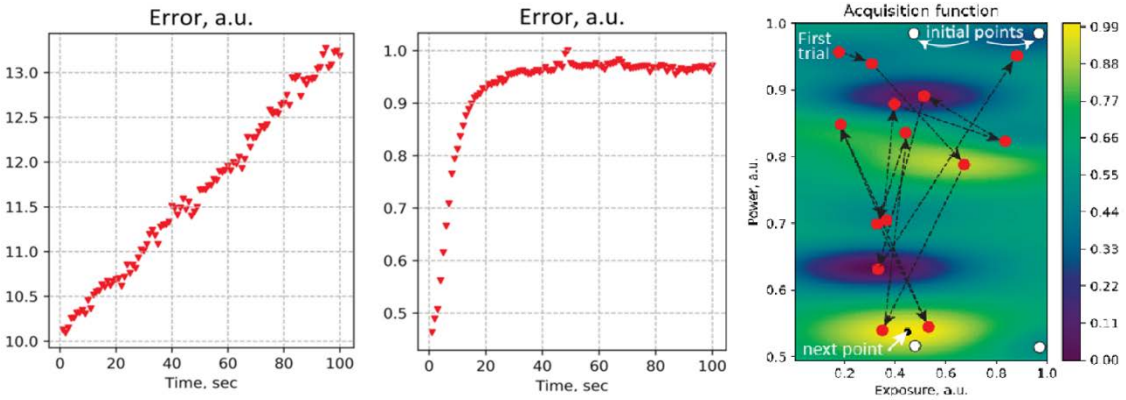


Рис. 2. Первые два графика показывают количество ошибок реконструкции от времени, за которое проводилась съемка одного участка образца. Третий рисунок показывает траекторию «блужданий» точек выбираемых параметров съемки по двумерной карте экспозиция-мощность. Цветом обозначена оценка объема новой информации, которая может быть получена при измерении соответствующей точки

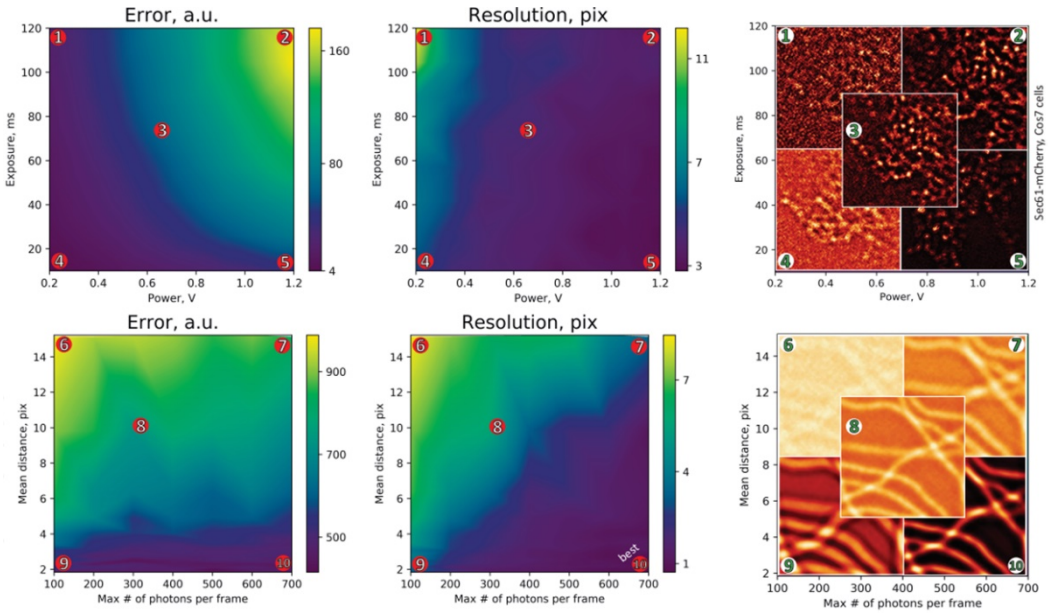


Рис. 3. Сравнение карт ошибок и разрешения (слева) с полученными реконструкциями (по центру). В верхней части приведены экспериментальные данные, снизу – симулированные

Литература

1. *Gustafsson* [*et al.*]. Fast live-cell conventional fluorophore nanoscopy with ImageJ through super-resolution radial fluctuations // Nature Communications. 2016. V. 7.
2. *Marin van Heel, Michael Schatz.* Fourier shell correlation threshold criteria // Journal of Structural Biology. 2005. V. 151. I. 3. P. 250-262.
3. *Culley* [*et al.*]. Quantitative mapping and minimization of super-resolution optical imaging artifacts // Nature Methods 15. 2018. P. 263-266.
4. *Srivinas* [*et al.*]. Gaussian Process Optimization in the Bandit Setting: No Regret and Experimental Design // Proceedings of ICML. 2010. P. 1015-1022.
5. *Shahriari* [*et al.*]. Taking the Human out of the Loop: A Review of Bayesian Optimization // Proceedings of the IEEE. 2015. V. 104. I. 1. P. 148-175.

УДК 577.322.24

Исследование структурных и термодинамических свойств однодоменных антител

А.Н. Юденко, И.Е. Елисеев

Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук

Однодоменные антитела, также известные, как «нанотела», содержат вариабельную часть тяжелых цепей антител. Впервые они были обнаружены в сыворотке крови верблюда [1]. Они имеют несколько преимуществ, включая высокую аффинность, относительно высокую стабильность и простоту получения в условиях биотехнологического производства. Эти свойства позволяют использовать однодоменные антитела как в исследовательских целях, так и в терапии опухолевых заболеваний [2].

В данной работе были исследованы три новых однодоменных антитела против человеческого рецептора ErbB3. ErbB3, также известный, как HER3 – представитель рецепторных тирозин-киназ, которые крайне часто аномально экспрессируются на поверхности опухолевых клеток. На сегодняшний день в клинике применяется ряд препаратов, направленных на подавление активности ErbB1 (EGFR) и ErbB2 (HER2): трастузумаб (назначается при раке молочной железы), цетуксимаб (при колоректальном раке и др.), эрлотиниб (при раке поджелудочной железы, раке легких и др.), афатиниб (при немелкоклеточном раке легкого) и др. Долгое время считалось, что ErbB3 не обладает киназной активностью, следовательно, не влияет на развитие опухолей. Однако в последние 15 лет были проделаны работы, достоверно доказывающие влияние повышенной экспрессии ErbB3 на развитие резистентности к анти-EGFR и анти-ErbB2 терапиям [3].

В настоящей работе VHH-антитела были экспрессированы вместе с белком-партнером SUMO в цитоплазме клеток *E.coli* штамма *SHuffle* [4]. Для того, чтобы иметь полное представление о механизме связывания и стабильности данных антител, был проведен ряд биофизических исследований. Методом поверхностного плазмонного резонанса была измерена кинетика связывания с внеклеточной частью рецептора ErbB3.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (уникальный идентификатор RFMEFI57716X0217, соглашение No 14.577.21.0217).

Литература

1. *Hamers-Casterman C.* [*et al.*]. Naturally occurring antibodies devoid of light chains // Nature. 1993. V. 363. N 6428. P. 446.
2. *Steeland S., Vandenbroucke R.E., Libert C.* Nanobodies as therapeutics: big opportunities for small antibodies // Drug discovery today. 2016. V. 21. N. 7. P. 1076–1113.
3. *Garrett J.T.* [*et al.*]. Transcriptional and posttranslational up-regulation of HER3 (ErbB3) compensates for inhibition of the HER2 tyrosine kinase //Proceedings of the National Academy of Sciences. 2011. V. 108. N 12. P. 5021–5026.
4. *Eliseev I.E.* [*et al.*]. Crystal structures of a llama VHH antibody BCD090-M2 targeting human ErbB3 receptor // F1000Research. 2018. V. 7.

УДК 576.342

Изучение на молекулярном уровне схемы транспорта из эндоплазматического ретикулума в аппарат Гольджи

***А. Нурдинова*[1], *J.Jung*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Европейская молекулярно-биологическая лаборатория

Секреторный путь в высших эукариотах служит средством транспорта молекул на поверхности внешней и внутриклеточных мембран (рис. 1). Новый правильно собранный материал из эндоплазматического ретикулума (ЭР) проходит через аппарат Гольджи и попадает к своей конечной цели [1]. Слаженность данного процесса позволяет доставлять все необходимые белки и липиды к мембранным органеллам и таким образом поддерживать клеточный гомеостаз. Так как

данный механизм транспорта характерен для множества разных молекул, необходима четкая регуляция процесса [2].

Известно, что цитоскелет клетки также играет особую роль в транспорте. Он является движущей и направляющей силой данного процесса. Но до сих пор неизвестно, как именно цитоскелет взаимодействует с транспортной системой на границе ЭР-Гольджи [3, 4]. Также любопытно узнать, как данная система связана с сигнальным механизмом, стимулированным эпидермальным фактором роста [5].

В данной работе мы интересуемся клеточным транспортом от ЭР до аппарата Гольджи в человеческих клетках и хотим выяснить связь данного процесса с организацией цитоскелета.

Мы использовали массовый скрининг с помощью метода РНК-интерференции (microscopy-based genome-wide RNA interference screens in cultured human cells) [6]. Подавляя экспрессию генов, кодирующих «цитоскелетные» белки, затем кодирующих транспортные, затем их попарные всевозможные комбинации, можно выявить функциональную связь между данными белками. Причем возможно проанализировать большое количество генов за одну процедуру. Для оценки эффективности транспорта при этом использовался подход [7] на основе заражения клеток вирусом везикулярного стоматита (VSV). После заражения клетка производит большое количество белка VSVG-ts045-YFP, который концентрируется в зависимости от температуры либо в ЭР, либо на клеточной мембране. Его можно детектировать при помощи флуоресцентной микроскопии.

Был найден ряд генов, подавление которых ведет к ослаблению или ускорению транспорта в клетке. Проведен статистический анализ значимости некоторых из них. На графиках ниже (рис. 2) представлены некоторые результаты эксперимента. На картинке справа видно, что ослабление генов, ответственных за «цитоскелетный» и транспортный белки, по отдельности не приводит к значительному изменению транспорта нашего покрашенного груза. Но при комбинированном подавлении наблюдается ослабление транспорта почти в два раза. Значит, между этими белками есть функциональная связь. Далее было интересно проверить влияние ослабления экспрессии данных генов на другие системы клетки (например, на организацию ЭР и лизосом, рецепторный эндоцитоз и т.д.), чтобы говорить о специфичности эффекта. Для примера на рис. 3 сравниваются количество и локализация лизосом в клетках до и после подавления наших генов. Из таких вот данных был сделан вывод о том, что при уменьшении количества белков, которые кодируют эти гены, остальные системы клетки функционируют нормально. А значит, данный белок цитоскелета действительно играет важную роль только в транспорте от ЭР в аппарат Гольджи.

Уже получено много данных, но еще предстоит проанализировать остальные гены, имеющие эффект на транспорт, затем собрать все составляющие в одну цельную картину и понять, какую именно функцию выполняет цитоскелет в транспорте от ЭР в аппарат Гольджи.

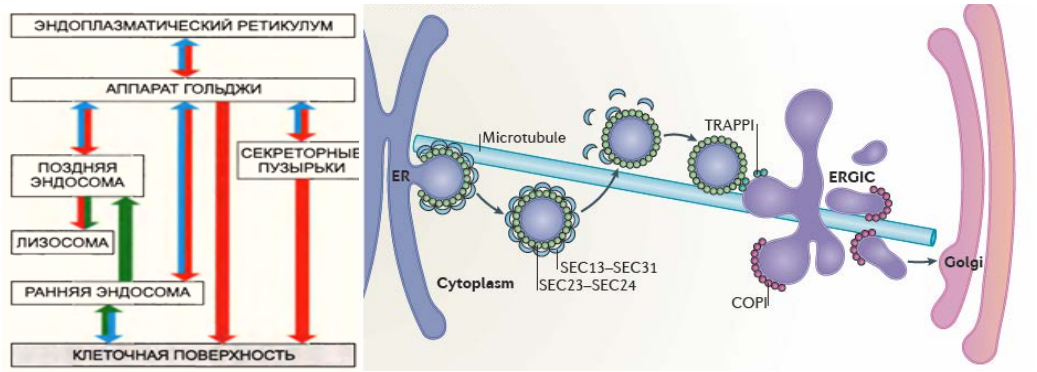


Рис. 1. Слева: «карта» биосинтетического секреторного (красный) и эндоцитозного (зеленый) путей. Голубым показаны пути возврата. Справа: схема транспорта из ЭР в аппарат Гольджи

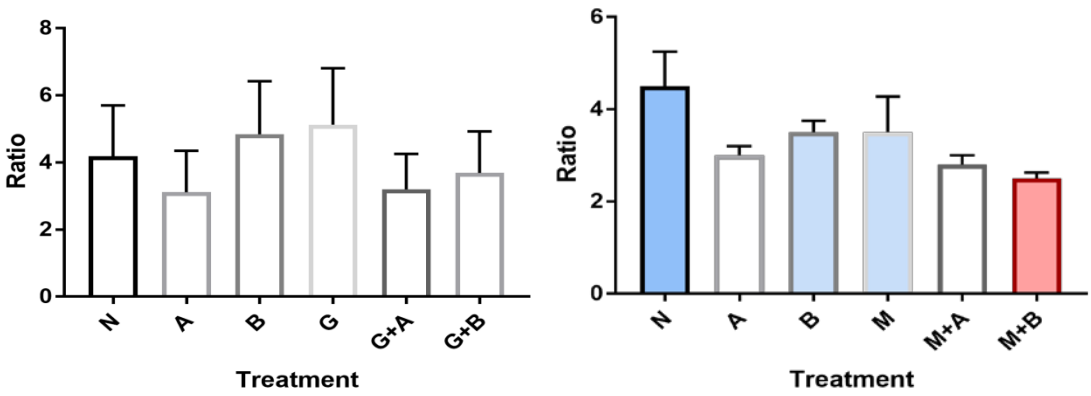


Рис. 2. Количество белка VSVG-ts045-YFP на мембране по отношению к общему числу в клетке при разных условиях. A, B – подавлены два гена, ответственных за транспортный белок. Гены G и M соответствует белкам цитоскелета. N – отрицательный контроль, нормальные клетки

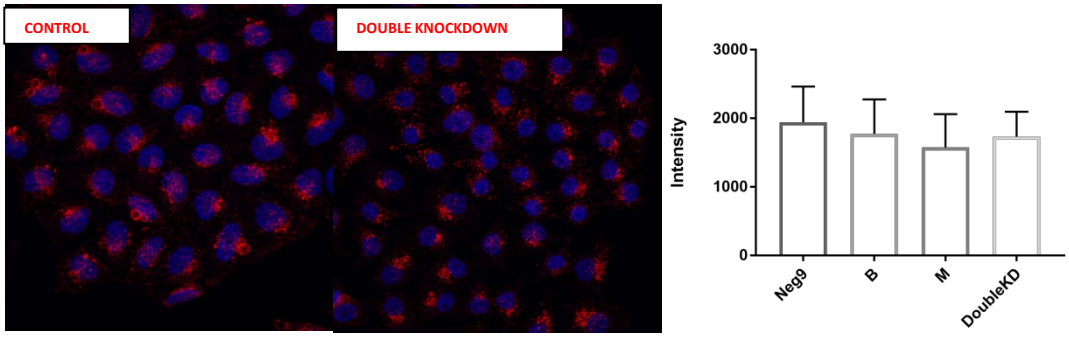


Рис. 3. Наблюдение организации и количества лизосом в клетках при двойном подавлении генов M и B

Литература

1. *Behnia R., Munro S.* Organelle identity and the signposts for membrane traffic // Nature. 2005. 438. P. 597–604.
2. *Bonifacino J.S., Glick B.S.* The mechanisms of vesicle budding and fusion // Cell. 2004. 116. P. 153–166.
3. *Brandizzi F., Barlowe C.* Organization of the ER-Golgi interface for membrane traffic control // Nature Reviews Molecular Cell Biology. 2013. 14(6). P. 382–392.
4. *Simpson J. C., Joggerst B.* [*et al.*] Genome-wide RNAi screening identifies human proteins with a regulatory function in the early secretory pathway // Nature Cell Biology. 2012. 14(7). P. 764–774.
5. *Scharaw S.* [*et al.*] The endosomal transcriptional regulator RNF11 integrates degradation and transport of EGFR // Journal of Cell Biology. 2016. 215(4). P. 543–558.
6. *Simpson J. C.* [*et al.*] An RNAi screening platform to identify secretion machinery in mammalian cells // J. Biotechnol. 2007. 129. P. 352–365.
7. *Boncompain G., & Perez F.* Fluorescence-based analysis of trafficking in mammalian cells // Methods in Cell Biology. 2013. V. 118.

УДК 571.27

Идентификация нейтрофилов, ассоциированных с кровеносными и лимфатическими сосудами в легких мышей с воспалением, вызванным ингаляцией спор гриба *Aspergillus fumigatus*

***А.О. Смирнова*[1,2], *А.О. Богородский*[1], *Е.Л. Болховитина*[2], *А.М. Сапожников*[2], *В.И. Борщевский*[1], *М.А. Шевченко*[2]**

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

Нейтрофилы являются основными медиаторами иммунного ответа против экзогенных патогенов бактериальной, вирусной и грибной природы [1]. Резервный пул нейтрофилов находится

в костном мозге, откуда они выходят в кровоток и в отсутствие инфекции циркулируют вместе с кровью. При проникновении экзогенного возбудителя нейтрофилы быстро мигрируют на периферию, в очаг воспаления. Считают, что нейтрофилы – короткоживущие клетки (3–5 дней), основной функцией которых является нейтрализация патогена [2]. Для этой цели они реализуют несколько стратегий, в частности, выброс активных форм кислорода, фагоцитоз или нетоз [3]. До недавнего времени наиболее популярной была гипотеза о том, что пришедшие в очаг воспаления нейтрофилы погибают на периферии нетозом, некрозом или апоптозом, но не возвращаются в кровоток. Однако, Abadie и соавторы [4] показали, что пришедшие по кровеносным сосудам в ткани нейтрофилы способны проникать в лимфатические сосуды и далее мигрировать в близлежащие лимфатические узлы. Более того, присутствие нейтрофилов необходимо для активации CD8-положительных Т-клеток в ответ на бактериальную инфекцию [5]. Способность нейтрофилов мигрировать из очага воспаления по лимфатическим сосудам не только подтвердила возможность активации адаптивного ответа, но и разрешила вопрос о пространственном аспекте взаимодействия нейтрофилов и Т-лимфоцитов [6]. Активация адаптивного иммунного ответа очень важна при борьбе как с бактериальными, так и с вирусными инфекциями, а также с заболеваниями, обусловленными патогенном грибной природы [7]. Ранее мы проводили исследования интернализации конидий нейтрофилами и антиген-презентирующими клетками, ассоциированными со слизистой оболочкой главного бронха [8]. При этом был прослежен вклад каждой из популяций в интернализацию спор гриба *Aspergillus fumigatus*. Поглотившие конидии нейтрофилы наблюдались как в просвете дыхательного пути, так и в стенке дыхательного пути.

Целью данной работы являлось исследование способности нейтрофилов, ассоциированных со слизистой оболочкой дыхательных путей, мигрировать по лимфатическим сосудам в условиях инфекции условнопатогенным грибом *A. fumigatus.*

Для достижения цели необходимо было количественно охарактеризовать ассоциацию нейтрофилов дыхательных путей с кровеносными и лимфатическими сосудами в различные временные интервалы после ингаляции конидий гриба *A. fumigatus*.

Для этого в разные промежутки времени после ингаляции спор гриба, меченых Alexa700, образцы дыхательных путей мышей были отобраны и подвержены инкубации со следующими антителами: для идентификации нейтрофилов – крысиными анти-Ly6G, для определения кровеносных сосудов – анти-D31 козы и с маркером лимфатических сосудов – анти-Lyve-l кролика. Затем применяли смесь вторичных антител осла: против иммуноглобулинов крысы, конъюгированных с флуоресцентной меткой Alexa488, против иммуноглобулинов козы, коньюгированных с Alexa555 и против иммуноглобулинов кролика-Alexa647. Для визуализации клеток эпителия и гладкой мускулатуры образцов использовали Phalloidin-Atto425. Ядра были окрашены Hoechst33342. Одновременная визуализация нейтрофилов, лимфатических и кровеносных сосудов была осуществлена с помощью конфокального лазерного сканирующего микроскопа Zeiss 780 с применением единого детектора и последующего спектрального разделения. Количественный анализ нейтрофилов в кровеносных и лимфатических сосудах, а также стенок главного бронха проводился с помощью программного обеспечения Zen и Fiji.

Показали, что уровень $Ly6G^+$ нейтрофилов в стенке дыхательного пути (очаге воспаления) достоверно возрастал уже через 6 часов после ингаляции конидий, при этом максимум был зафиксирован через 12 часов после ингаляции (рис. 1). Этот интервал и был выбран для дальнейшего исследования миграции нейтрофилов. Массовая миграция нейтрофилов по $CD31^+$ кровеносным сосудам наблюдалась в острой фазе воспаления (рис. 2). При этом в единичных случаях нейтрофилы были ассоциированы с $CD31^+$ $LYVE\text{-}1^+$ капиллярными лимфатическими сосудами (рис. 2).

Таким образом, была количественно охарактеризована временная зависимость миграции нейтрофилов в ткани, а именно в стенку дыхательного пути в процессе развития воспаления. Кроме того, были отработаны подходы и получены данные о миграции нейтрофилов по кровеносным и лимфатическим сосудам.

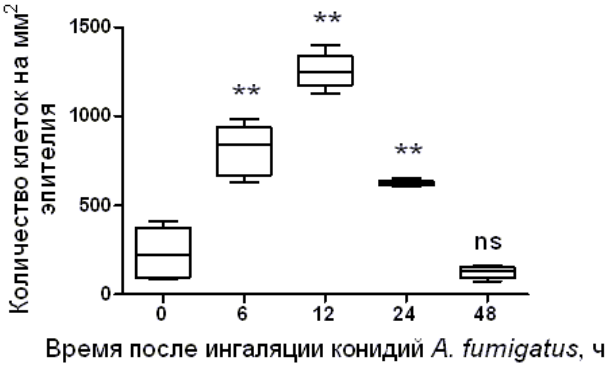


Рис. 1. Изменение количества нейтрофилов в стенке дыхательного пути в процессе развития воспаления в ответ на ингаляцию конидий гриба *A. fumigatus*. Данные представлены в виде медианы и квартилей как минимум для 4 мышей на группу. Достоверные различия относительно группы интактных мышей (время 0 ч): ** – $p \leq 0.01$; ns – не достоверно

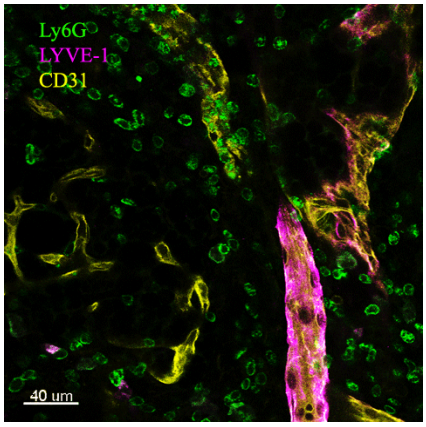


Рис. 2. Нейтрофилы в дыхательных путях мыши через 12 часов после ингаляции спор гриба. Нейтрофилы ($Ly6G^+$, зеленый), ассоциированые с кровеносными сосудами ($CD31^+$, желтый) и с капиллярными лимфатическими сосудами ($LYVE\text{-}1^+$, розовый)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-315-00166.

Литература

1. *Silvestre-Roig C.* [*et al.*]. Neutrophil heterogeneity: implications for homeostasis and pathogenesis // Blood. 2016. V. 18. N. 127. P. 2173-2181.
2. *Pillay J.* [*et al.*]. In vivo labeling with 2H2O reveals a human neutrophil lifespan of 5.4 days // Blood. 2010. V. 4. N. 116. P.625-627.
3. *Lu T.* [*et al.*]. A NET Outcome // Front Immunol. 2012. N. 3. P. 365.
4. *Abadie V.* [*et al.*]. Neutrophils rapidly migrate via lymphatics after Mycobacterium bovis BCG intradermal vaccination and shuttle live bacilli to the draining lymph nodes // Blood. 2005. V. 5. N. 106. P. 1843-1850.
5. *Hampton H.R.* [*et al.*]. Microbe-dependent lymphatic migration of neutrophils modulates lymphocyte proliferation in lymph nodes // Nat. Commun. 2015. N. 6. P. 7139.
6. *Abi Abdallah D.S.* [*et al.*]. Mouse neutrophils are professional antigen-presenting cells programmed to instruct Th1 and Th17 T-cell differentiation // Int Immunol. 2011. V. 5. N. 23. P. 317-326.
7. *Thakur R.* [*et al.*]. Cytokines induce effector T-helper cells during invasive aspergillosis; what we have learned about T-helper cells? // Front Microbiol. 2015. N. 6. P. 429.
8. *Shevchenko M.A.* [*et al.*]. Elimination of Aspergillus fumigatus conidia from the airways of mice with allergic airway inflammation // Respiratory Research. 2013. N. 14. P. 78.

УДК 577.353.332

Исследование генетического разнообразия LOV-фоторецепторов

Д.А. Мелихова, П.И. Буслаев, И.Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Жизнедеятельность клетки обеспечивается множеством разнообразных процессов. Некоторые из них регулируются светом с помощью специализированных фоторецепторов. Примером таких фоторецепторов являются белки, содержащие так называемые LOV (light, oxygen, voltage) домены, которые имеют небольшой размер и связывают кофакторы семества флавинов в качестве хромофоров. При поглощении света кофактором структура LOV-домена изменяется, благодаря чему становится возможной передача сигнала от сенсора к эффекторным доменам [1].

В последнее время всё более доступными становятся методы секвенирования геномов. В связи с этим, научное сообщество получает всё большее количество данных о последовательностях различных организмов. Для эффективной обработки и анализа поступающего потока данных активно применяются биоинформатические алгоритмы. Одна из задач, решаемых с помощью данных алгоритмов, — это поиск белков, принадлежащих определённому семейству, в новых сиквенсах. Для LOV-доменов подобный поиск был проведен в 2016 году [2]. Было найдено более 6700 возможных LOV-доменов, что в три раза превысило число известных на тот момент. В большинстве случаев при фотоактивации LOV-доменов консервативный цистеин образует ковалентную связь со связанным хромофором. В связи с этим в работе по поиску LOV-доменов авторы требовали наличия цистеина в консервативном положении. Однако известно, что некоторые LOV-домены не имеют цистеина в консервативном положении [3]. Таким образом, результат биоинформатического поиска, проведённого в 2016 году, нельзя считать полным [2]. Кроме того, число отсеквенированных организмов продолжает расти. В данной работе был проведен поиск LOV-доменов, включая и не содержащие цистеин, по обновленным базам последовательностей организмов, в том числе не представленных в работе 2016 года [2]. Также был проведен анализ частоты встречаемости различных аминокислотных остатков на определенных позициях и филогенетический анализ найденных последовательностей.

Литература

1. *Aba Losi, Wolfgang Gartner* Solving Blue Light Riddles: New Lessons from Flavin-binding LOV Photoreceptors // Photochemistry and Photobiology. 2017. V. 93. N 1. P. 141–158.
2. *Spencer T. Glantz* [*et al.*]. Functional and topological diversity of LOV domain photoreceptors. // Proc. Natl. Acad. Sci. 2016. V. 113. N 11 P. E1442 – E1451.
3. *Estella F. Yee1* [*et al.*]. Signal transduction in light–oxygen–voltage receptors lacking the adduct-forming cysteine residue. // Nat. Commun. 2015. V. 6. N 1. P. 10079.

УДК 536.4

Исследование структурных изменений в липидных везикулах в двух фазах

М.И. Рулев[1,3]***, А.А. Павлова***[2]***, А.И. Иваньков***[1,3,4]***, Д.В. Соловьев***[1,3,5]***, А.В. Рогачев***[1,3]***, В.В. Ской***[1,6]***, В.В. Чупин***[3]***, В.И. Горделий***[3,7,8]***, А.И. Куклин***[1,3]

[1]Объединенный институт ядерных исследований
[2]Воронежский государственный технический университет
[3]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[4]Институт проблем безопасности атомных электростанций НАН Украины
[5]Taras Shevchenko National University of Kyiv
[6]Московский государственный университет им.МВ.Ломоносова
[7]Institute of Complex Systems (ICS-6)
[8]Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Université Grenoble Alpes–Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives–CNRS

Биологическая клеточная мембрана состоит из липидов и мембранных белков. Благодаря этому липидная мембрана представляет собой хорошую модель для ряда биофизических исследований. Изучение липидных мембран вблизи точки фазового перехода имеет важное значение не только для теоретического понимания процессов [1], но и с биологической точки зрения, поскольку состояние клеточной мембраны играет важную роль в биологических процессах [2].

В настоящей работе исследованы однослойные везикулы (ULV) липидов DMPC и DPPC разных размеров, полученные экструдированием через трековые мембраны с размером пор в 300 и 500 Å.

Структурные исследования были проведены с помощью малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. С помощью программы SASView и кривых малоуглового рассеяния были рассчитаны параметры везикулы с использованием модели многослойной сферической оболочки. Обнаружено, что во время главного фазового перехода с увеличением температуры увеличивается внутренний радиус, а также площадь поверхности везикулы. Этот процесс обусловлен изменением гидратации липидных голов (к девяти молекулам воды приходящимся на одну липидную голову в гель фазе добавляется еще три в жидко-кристаллической фазе [2]). Также происходит уменьшение толщины липидной мембраны, что сообщает нам о процессе «плавления» липидных хвостов [3]. Мы показали связь между внутренними радиусами и толщинами везикул как функцию температуры вблизи точки фазового перехода с использованием малоуглового нейтроного рассеяния (МУРН) и малоуглового рентгеновского рассеяния (МУР). Измерения МУРН проводились на малоугловом спектрометре ЮМО (ИБР-2, ОИЯИ, Дубна, Россия) [4], МУРР проводились на BM29 (ESRF, Гренобль, Франция). Полученные результаты обсуждаются.

Литература

1. *Gordeliy V.I., Cherezov V., & Teixeira J.* Strength of thermal undulations of phospholipid membranes // Physical Review E. 2005. 72(6). 061913.
2. *Kharakoz D.P.* On a possible biological role of the phase transition liquid-solid in biological membranes // Usp. Biol. Khim. 2001. 333–364.
3. *Soloviov* [*et al.*]. Changes in the Area per Lipid Molecule by P–V–T and SANS // Investigations in Macromolecular Symposia. 2014. V. 335. N 1. P. 58–61.
4. *Kuklin A.I., Islamov A.K., & Gordeliy V.I.* Scientific reviews: Two-detector system for small-angle neutron scattering instrument // Neutron News. 2005. 16(3). 16–18.

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ

Председатель: Н.Н. Колачевский (д.ф.-м.н., член-корр. РАН)

Зам. председателя: В.С. Лебедев (д.ф.-м.н., профессор),

С.Ю. Савинов (д.ф.-м.н.)

Секретарь: Н.О. Жаднов

Дата: 22.11.2018

Время: 10:00

Место: Москва, Ленинский проспект, д. 53, Колонный зал, ФИАН

УДК 533.9.03, 535:530.182

Влияние влажности воздуха на распространение лазерных импульсов в режиме филаментации

***Г.Э. Ризаев*[1,2], *Д.В. Мокроусова*[2], *А.В. Шалова*[1], *А.В. Шутов*[2], *Л.В. Селезнев*[2], *А.А. Ионин*[2]**

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

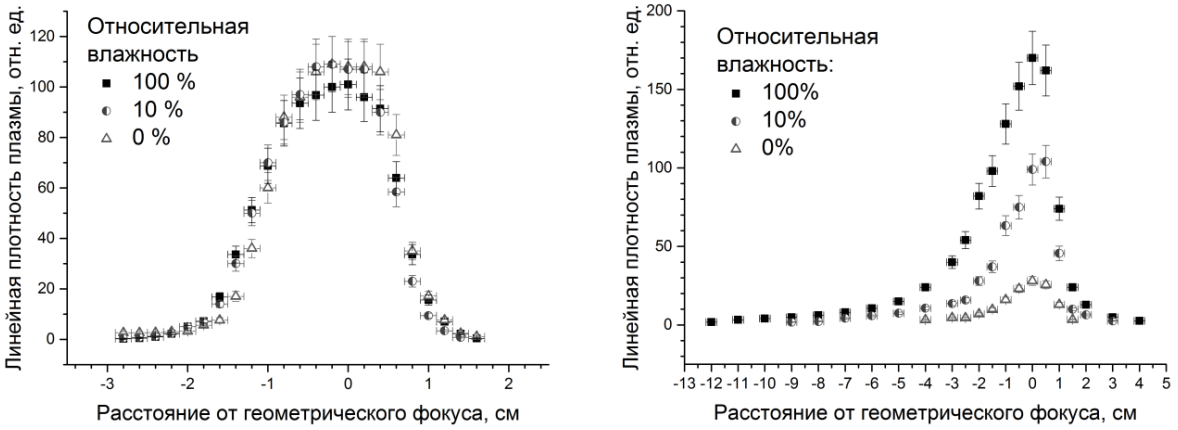
Филаментацией называется явление локализации лазерного излучения, которое происходит вследствие динамической конкуренции керровской самофокусировки и дефокусировки излучения на лазерной плазме. Это явление привлекает широкий интерес в связи с большим количеством возможных применений. Например, поскольку в режиме филаментации возможно передавать излучение на большие расстояния с сохранением высокой интенсивности, филаменты могут использоваться для управления высоковольтными разрядами [1], осуществления экологического мониторинга [2], создания волноводов для СВЧ-излучения [3]. В этой связи необходимо знать, как различные параметры среды влияют на процесс филаментации. Один из таких параметров – влажность воздуха. Недавно было показано [4], что при ионизации атмосферного воздуха излучением длиной волны 248 нм присутствие паров воды оказывает значительное влияние. Однако в [4] не рассматривались эффекты распространения излучения. Целью данной работы было изучить влияние паров воды на плазмообразование при распространении импульсов как УФ-, так и ИК-спектральных диапазонов в режиме филаментации.

Эксперимент проводился с излучением титан-сапфировой лазерной системы с центральной длиной волны 744 нм, длительностью импульса 90 фс и энергией в импульсе 0,4 мДж. Также были проведены исследования с импульсами третьей гармоники длиной волны 248 нм, длительностью 140 фс и энергией 22 мкДж. С помощью линзы излучение фокусировалось в пространство между электродами, помещенными в камеру, в которой контролировалась влажность воздуха. Фокусное расстояние линзы составляло 50 см для ИК-импульсов и 42 см для УФ-импульсов. Таким методом измерялась линейная плотность плазмы в зависимости от расстояния между линзой и электродами при разных значениях относительной влажности воздуха. Температура на протяжении эксперимента была постоянной и составляла 20°C.

На рис. 1 представлены полученные в эксперименте зависимости линейной плотности плазмы от расстояний до геометрического фокуса линзы для ИК импульсов (рис. 1а) и УФ импульсов (рис. 1б). Из графика видно, что влажность воздуха почти не оказывает влияния на филаментацию ИК-импульсов, в то время как при филаментации УФ-излучения пиковая плотность

плазмы сильно возрастает при увеличении влажности воздуха, а также увеличивается протяженность плазменного канала.

Таким образом, результаты проведенного эксперимента показывают, что относительная влажность воздуха оказывает существенное влияние на образование плазмы и должна приниматься во внимание при использовании УФ-импульсов, распространяющихся в режиме филаментации. Для ИК-импульсов параметры образующегося плазменного канала практически не зависят от влажности окружающего воздуха.



а) б)

Рис. 1. Зависимость линейной плотности плазмы от расстояния до геометрического фокуса при различной влажности воздуха для λ = 744 нм (а) и λ = 248 нм (б)

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00726.

Литература

1. *Liu X., Lu X., Zhang Z., Liu X. L., Ma J. L., & Zhang J.* Triggering of high voltage discharge by femtosecond laser filaments on different wavelengths // Optics Communications 2011. V. 284. P. 5372–5375.
2. *Ионин А.А., Мокроусова Д.В., Селезнев Л.В., Синицын Д.В., Сунчугашева Е.С.* Детектирование тонких пленок нефтепродуктов на водной поверхности с помощью УФ-филаментов // Оптика атмосферы и океана 2016. Т. 29. № 4. С. 200–203.
3. *Зворыкин В.Д., Левченко А.О., Устиновский Н.Н., Сметанин И.В.* Транспортировка СВЧ излучения в плазменных волноводах скользящих мод // Письма в ЖЭТФ 2010. Т. 91. № 5. С. 244–248.
4. *Shutov A.V., Ustinovskii N.N., Smetanin I.V., Mokrousova D.V., Goncharov S.A., Ryabchuk S.V., Sunchugasheva E.S., Seleznev L.V., Ionin A.A., Zvorykin V.D.* Major pathway for multiphoton air ionization at 248nm laser wavelength // Applied Physics Letters 2017. V. 111, N 22. 224104.

УДК 539.18

Лазер для получения одетых состояний и последующего охлаждения атомов тулия

***Д.А.Мишин*[1,2], *Д.И.Проворченко*[1,2], *Е.С.Федорова*[1], *Д.О.Трегубов*[1]**

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

Всё чаще в современных исследованиях используются «холодные атомы», то есть ансамбли частиц при температурах ниже 1 мК. Такие атомы можно дольше (до нескольких секунд) удерживать в ловушках, за счет чего подавляются доплеровское и времяпролетное уширения линий. Это делает холодные атомы удобными для создания стандартов частоты и логических элементов квантовых компьютеров, их используют для исследования дрейфа фундаментальных констант и проверки физических теорий. В настоящее время большой интерес в данной области вызывают лантаноиды, незаполненная 4-f оболочка которых экранирована от внешних электрических полей заполненными 5-s и 6-s оболочками. В нашей лаборатории исследуются атомы тулия, на данный момент в ФИАН было проведено их лазерное охлаждение до температур порядка

10 мкК [1], найден часовой переход между тонкими уровнями основного состояния атома [2] и измерена его дифференциальная поляризуемость [3]. Дальнейшей целью является использование испарительного охлаждения для получения бозе-эйнштейновского конденсата, но, чтобы увеличить эффективность данного процесса, начальную температуру атомов в ловушке необходимо понизить. Предельная температура при доплеровском охлаждении пропорциональна ширине перехода $k_B T = \frac{\hbar \Gamma}{2}$ [4], поэтому, чтобы получить температуру менее 1 мкК с помощью доплеровского охлаждения, необходимо использовать охлаждающий переход с естественной шириной порядка 10 кГц. В качестве такого перехода предлагается использовать часовой переход, уширенный, например, с помощью использования одетых состояний.

Основная идея метода заключается в том, чтобы с помощью светового поля примешать к верхнему уровню часового перехода небольшую долю более широкого уровня. Для получения одетого уровня был найден подходящий переход между уровнями $4f^{13}(^2\mathrm{F}^\circ)6s^2$ (J = 5/2) и $4f^{12}(^3\mathrm{F}_2)5d_{5/2}6s^2$ (J = 7/2) на длине волны 402,26 нм [5]. Диодный лазер с $\lambda = 405$ нм был охлаждён до 15°C, что позволило снизить рабочую длину волны лазера и зафиксировать искомый переход на частоте 745061.6 ± 0.1 ГГц. Лазер привязан к найденной частоте по измерителю длин волн «WSU-30» с обратной связью, меняющей напряжение на пьезокерамике, что позволило стабилизировать его с точностью до 14 МГц. Этот лазер позволяет «одеть» часовой уровень тулия. Чтобы обнаружить уширение, мы будем измерять время жизни верхнего уровня часового перехода в присутствии «одевающего» излучения. После получения одетого уровня, мы будем готовы приступать к следующей ступени охлаждения атомов, что является ещё одним шагом в направлении получения бозе-конденсата.

Литература

1. *Sukachev DD, Kalganova ES, Sokolov AV, Fedorov SA, Vishnyakova GA, Akimov AV, Kolachevsky NN, Sorokin VN.* Secondary laser cooling and capturing of thulium atoms in traps // Quantum Electronics. 2014. 44(6):515.
2. *Golovisin A, Fedorova E, Tregubov D, Sukachev D, Khabarova K, Sorokin V, Kolachevsky N.* Inner-shell clock transition in atomic thulium with small BBR shift // 2018 arXiv:1809.02215.
3. *Golovizin A.A., Kalganova E.S.,Sukachev D.D., Vishnyakova G.A., Tregubov D.O., Khabarova K.Yu., Sorokin V.N., Kolachevsky N.N.* Methods for determining the polarisability of the fine structure levels in the ground state of the thulium atom // Quantum Electronics. 2017 47(5):479.
4. *Phillips WD.* Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. Reviews of Modern Physics. 1998 Jul 1;70(3):721. (https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.70.721).
5. *Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team* (2018). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.5.6), [Online]. Available: https://physics.nist.gov/asd [2018, October 10]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

УДК 539.18

Подготовка внутренних состояний охлажденных атомов тулия с помощью оптической накачки

***Д.И. Проворченко*[1,2], *Д.А. Мишин* [1,2], *Д.О. Трегубов*[1], *Е.С. Федорова*[1]**

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

Тулий – редкоземельный элемент с единственной вакансией на внутренней 4f оболочке. Эта оболочка значительно экранирована от внешних электрических полей, в том числе теплового излучения окружающей среды. Это делает тулий перспективным кандидатом для использования его в прецизионных измерениях. Кроме того, тулий обладает большим, в сравнении со щелочными металлами, магнитным моментом основного состояния (4 единицы в магнетонах Бора), и большим количеством резонансов Фешбаха. Это дает возможность использовать его в квантовых симуляциях. На данный момент в ФИАН было проведено лазерное охлаждение атомов тулия до температур порядка 10 мкК [1], найден часовой переход между тонкими уровнями основного состояния атома [2] и измерена его дифференциальная поляризуемость [3]. Для дальнейших целей

необходимо иметь возможность эффективно подготавливать атомы в состояниях с определенной проекцией магнитного момента, и наиболее простым способом это сделать является оптическая накачка. В работе экспериментально исследуется возможность использования перехода между уровнями $4f^{13}(^2F^0)6s^2(J=7/2)$ и $4f^{12}(^3F^4)5d_{5/2}6s^2(J=7/2)$ на длине волны 418 нм для этих целей.

Основная идея оптической накачки заключается в поиске так называемых темных состояний – состояний, однажды попав в которые атом перестает взаимодействия со светом. Например, состояния, которые не могут перейти в состояние с меньшей проекцией магнитного момента является темным при взаимодействии атома со светом σ^- поляризации. В случае перехода между уровнями с $F=F'$ такое состояние только одно – с наименьшей проекцией магнитного момента. Также для уровней с одинаковым полным моментом при воздействии на атомы линейно поляризованным светом переход $0\to 0$ является запрещенным, следовательно, состояние с $m_F=0$ является темным. В работе использовался титан-сапфировый лазер с длинной волны 836 нм и удвоитель частоты. Частота лазера стабилизируется по измерителю длин волн.

Для более точного определения частоты исследуемого перехода была проведена его спектроскопия в магнито-оптической ловушке (МОЛ). В результате работы были задетектированы переходы между всеми компонентами сверхтонкого расщепления обоих уровней. Переходы с уровня $F=4$ детектировались по уменьшению количества атомов в магнито-оптической ловушке, переходы с уровня $F=3$ по увеличению. Для последующей оптической накачки атомы перегружались в дипольную ловушку. Накачка происходила в присутствии внешнего однородного магнитного поля величиной примерно 1 Гс σ^- поляризованным светом. Так как поляризация света в эксперименте немного отличается от идеальной, состояние $m_F=-4$ не является польностью темным, поэтому, чтобы избежать лишнего нагрева, оптическая накачка осуществлялась короткими импульсами излучения, для формирования которых использовался АОМ. В результате была продемонстрирована накачка на уровень с $m_F=-4$ с эффективностью 75%. Её эффективность измерялась по глубине провала в спектре часового перехода.

Литература

1. *Sukachev DD, Kalganova ES, Sokolov AV, Fedorov SA, Vishnyakova GA, Akimov AV, Kolachevsky NN, Sorokin VN.* Secondary laser cooling and capturing of thulium atoms in traps // Quantum Electronics. 2014. 44(6):515.
2. *Golovisin A, Fedorova E, Tregubov D, Sukachev D, Khabarova K, Sorokin V, Kolachevsky N.* Inner-shell clock transition in atomic thulium with small BBR shift // 2018 arXiv:1809.02215.
3. *Golovizin A.A., Kalganova E.S.,Sukachev D.D., Vishnyakova G.A., Tregubov D.O., Khabarova K.Yu., Sorokin V.N., Kolachevsky N.N.* Methods for determining the polarisability of the fine structure levels in the ground state of the thulium atom // Quantum Electronics. 2017 47(5):479.

УДК 538.9

Об использовании приближения сильно связанных электронов в задаче о динамике электронов в кристалле в постоянном электрическом поле

Ю.М. Билинский, П.И. Арсеев

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

Приближение сильно связанных электронов [1] является одним из простых методов описания электронных спектров в кристаллах в случае, когда описание в терминах точных волновых функций невозможно. Оно подразумевает замену базиса настоящих собственных блоховских состояний на базис локализованных на атомах решетки функций, при этом между состояниями на соседних атомах подразумевается наличие туннелирования. Это приближение позволяет достаточно точно описывать динамику электронов, и оно ухватывает такие особенности кристаллической системы, как наличие зонной структуры, но при этом подразумевает отказ от изучения точной волновой функции атомных состояний на масштабах менее размера одного атома.

Это может привести к некоторым дополнительным проблемам в случае введения в задачу электромагнитного поля. В частности, в данном приближении невозможно изучать влияние полей, которые могут сильно изменяться на масштабах одного атома, а случаи, когда потенциалы неограниченно растут по времени и пространству, требуют особой аккуратности при введении поля. Дополнительные усложнения возникают, когда элементарная ячейка кристалла содержит несколько атомов, и нужно описывать эффект перехода электронов между зонами под действием поля.

Целью данной работы являлось получить последовательную процедуру введения поля и проведения калибровочного преобразования в приближении сильно связанных электронов на примере постоянного во времени и однородного электрического поля.

Известно, что при использовании калибровки $\mathbf{A}=0,\phi=-\mathbf{E}\mathbf{r}$ точный гамильтониан, построенный на собственных функциях Блоха, будет записываться в виде

$$\hat{H}(t)=\sum_{\mathbf{k},\alpha}\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger}(t)a_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t)-ie\mathbf{E}\sum_{\mathbf{k},\alpha}a_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger}(t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t)-e\mathbf{E}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha,\beta}a_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger}(t)L_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}a_{\mathbf{k}}^{\beta}(t). \qquad (6)$$

Здесь индексы α,β нумеруют зоны в кристалле, а индекс $\mathbf{k}$ – квазиимпульс электрона. Матрица $L_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}$ отвечает за переход электронов между зонами под действием поля и выражается через блоховские остатки как

$$L_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}=i\int_{\Omega}d\mathbf{r}u_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^{\beta}(\mathbf{r}).$$

Мы будем пользоваться двухзонным приближением и считать, что элементы $L_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}$ между рассматриваемыми зонами и всеми остальными настолько малы, что ими можно пренебречь. Если совершить в данном гамильтониане замену базиса типа

$$a_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t)=\sum_{n,i}\tilde{\theta}^{\alpha n\dagger}(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i^n}\psi_i^n(t),$$

где матрица $\tilde{\theta}^{\alpha n\dagger}(\mathbf{k})$ выбирается таким образом, чтобы избавиться от последнего члена в (6), а индекс i нумерует элементарные ячейки в кристалле, то гамильтониан переходит к виду

$$\hat{H}(t)=\sum_{i,j}\sum_{n,m}\psi_i^{n\dagger}(t)T_{i,j}^{n,m}\psi_j^m(t)-e\mathbf{E}\sum_i\sum_n\psi_i^{n\dagger}(t)\mathbf{R}_i^n\psi_i^n(t). \qquad (7)$$

Если мы будем считать, что элементарная ячейка кристалла содержит два атома, и если мы с самого начала будем строить гамильтониан в узельном представлении в приближении сильной связи, то мы получим аналогичное выражение для гамильтониана, при этом индексы n,m будут принимать два значения, соответствующие состояниям, локализованным на одном из двух атомах. Это позволяет придать операторам $\psi_i^{n\dagger}$ и ψ_i^n значение операторов вторичного квантования для состояния, локализованного на соответствующем атоме.

При переходе к калибровке $\phi=0,\mathbf{A}=-c\mathbf{E}t$ гамильтониан (6) принимает вид

$$\hat{H}(t)=\sum_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t)\left(\varepsilon(\mathbf{k})+e\mathbf{E}t\mathbf{v}_{\mathbf{k}}+\frac{e^2\mathbf{E}^2t^2}{2m}\right)a_{\mathbf{k}}(t). \qquad (8)$$

В этой записи для простоты записи опущены зонные индексы, при этом подразумевается суммирование по индексам по правилам произведения матриц, а также введено обозначение

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}=\frac{1}{m}\int_{\Omega}d\mathbf{r}u_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{r})\left[-i\nabla+\mathbf{k}\right]u_{\mathbf{k}}^{\beta}(\mathbf{r}).$$

Переходя аналогично предыдущему случаю к представлению локализованных атомных функций, получим

$$\hat{H}(t)=\sum_{i,j}\sum_{n,m}\tilde{\psi}_i^{n\dagger}(t)\left(1-ie\mathbf{E}t(\mathbf{R}_i^n-\mathbf{R}_j^m)\right)T_{ij}^{nm}\tilde{\psi}_j^m(t). \qquad (9)$$

Заметим, что в этом случае полученный гамильтониан отличается от формы, полученной в классической работе [2] для приближения сильной связи феноменологическим методом. Результаты этой работы оказываются неприменимы к случаю постоянного в пространстве электрического поля, если его описывать в терминах векторного потенциала. Аналогично, результаты отличаются от результатов работы [3], в которой использовалось однозонное приближение.

В настоящих физических задачах нам может быть неизвестна точная форма состояний, необходимая для получения для нахождения величин $L_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}$ и $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$. С другой стороны, мы можем определить некоторое количество интегралов перехода T_{ij}^{nm} для некоторого количества соседних атомов из численных расчетов и экспериментальных данных (см., например, [4]). Это позволяет использовать приближение сильной связи. В случае, когда элементарная ячейка состоит из двух атомов, на каждом из которых существует по одному связанному состоянию, то приближение сильной связи позволяет описать две электронные зоны, включая переходы между ними, и удобно в использовании. Это значит, что для корректного описания задачи нужно не только уметь переходить от гамильтонианов (6) и (8) к (7) и (9) соответственно, но и совершать обратные преобразования, когда явный вид волновых функций неизвестен. Обратный переход, основанный на нахождении собственных значений преобразований Фурье от матриц T_{ij}^{nm}, описанный в данной работе, оказывается корректен в использовании, если время эволюции электронов в системе по порядку меньше времени одной блоховской осцилляции. При больших временах становится важен явный вид блоховских волновых функций на масштабах, меньших размера одного атома, и приближение сильной связи становится неприменимо. Связь подходов в разных калибровках оказывается важной при рассмотрении задачи о межзонном переходе электронов под действием постоянного электрического поля.

Исследование поддержано грантом РФФИ 17-02-00394.

Литература

1. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. – М.:Наука, 1978. 616 с.
2. *Luttinger, J.M.* The Effect of a Magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential // Phys. Rev. 1951. V. 84, P. 814–817
3. *Kohn, Walter.* Theory of Bloch Electrons in a Magnetic Field: The Effective Hamiltonian // Phys. Rev. 1959. V. 115, P 1460–1478.
4. *Chadi, D.J.* Spin-orbit splitting in crystalline and compositionally disordered semiconductors // Phys. Rev. B 1977. V. 16, P 790–796.

УДК 530.12

Эффект Лензе-Тирринга в сильном поле

***Ш.Г. Хлгатян*[1], *В.Н. Строков*[1,2]**

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

Данная работа посвящена изучению вопроса эволюции полного углового момента в метрике Керра. В случае приближения слабого поля данный вопрос был изучен Лензе и Тиррингом и было получено, что плоскость орбиты массивной частицы будет прецессировать. Возникает вопрос, что происходит с угловым моментом массивных частиц в сильном поле.

В координатах Бойера–Линдквиста метрика Керра задается следующим образом [1]:

$$ds^2 = -\left(1-\frac{2r}{\rho^2}\right)dt^2 + \left(r^2 + a^2 + \frac{2ra^2}{\rho^2}\sin^2\theta\right)\sin^2\phi d\phi^2 - \\ -\frac{4ra}{\rho^2}\sin^2\theta d\phi dt + \frac{\rho^2}{\Delta}dr^2 + \rho^2 d\theta^2, \tag{1}$$

где a – собственный угловой момент черной дыры и

$$\rho^2 = r^2 + a^2\cos^2\theta, \\ \Delta = r^2 - 2r + a^2. \tag{2}$$

Мы используем систему единиц $G = c = 1$. Уравнения геодезических имеют вид [2]:

$$\rho^4 r'^2 = (E^2-1)r^4 + 2r^3 + [a^2(E^2-1) - L_z^2 - Q]r^2 +$$
$$+ 2[(aE - L_z)^2 + Q]r - a^2 Q \equiv R(r),$$
$$\rho^4 \dot{\theta}'^2 = Q - cos^2\theta\left[a^2(1-E^2) + \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}\right] \equiv \Theta(\theta), \qquad (3)$$
$$\rho^2 \dot{\phi}' = \frac{1}{\Delta}\left[2arE + (\rho^2 - 2r)\frac{L_z}{\sin^2\theta}\right],$$
$$\rho^2 \dot{t}' = a(L_z - aE\sin^2\theta) + \frac{r^2+a^2}{\Delta}[E(r^2+a^2) - aL_z],$$

где штрих означает дифференцирование по аффинному параметру.

В этой метрике сохраняются следующие величины: $E = -p_t$ – энергия частицы на бесконечности, $L_z = p_\phi$ – проекция полного момента импульса частицы на ось вращения черной дыры и так называемая константа Картера, которая задается следующим выражением [3]:

$$Q = p_\theta^2 + \cos^2\theta\left[a^2(E^2-1) + \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}\right]. \qquad (4)$$

Получается, что в метрике Керра сохраняется только проекция полного углового момента частицы на ось вращения черной дыры L_z, но не полный угловой момент L. Проекции полного углового момента на другие оси задаются следующим образом:

$$L_x = p_\theta \sin\phi + p_\phi \cos\phi \operatorname{ctg}\theta,$$
$$L_y = p_\phi \sin\phi \operatorname{ctg}\theta - p_\theta \cos\phi, \qquad (5)$$

и следовательно получим выражение для полного углового момента

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 = Q + \Delta Q, \quad \Delta Q = a^2(E^2-1)\cos^2\theta. \qquad (6)$$

Как видно из этого выражения вид годографа (кривая, которую рисует конец вектора) будет зависеть от трех параметров – $Q,\ a,\ E$ и от области изменения θ.

Изначально были рассмотрены возмущенные круговые экваториальные орбиты (для экваториальных орбит $Q = 0$), с возмущением $p_\theta = C << 1$. Выяснилось, что годографы этих орбит находятся между двумя близкими окружностями с радиусами $K_{max}^2 = C^2$ и $K_{min}^2 = C^2 \dfrac{L_z^2}{L_z^2 - a^2(E^2-1)}$.

Из выражения (5) видно, что при $E < 1$, т.е. для ограниченных орбит, при $Q >> 1$ годограф с большой точностью будет круговым. Случай при $Q << 1$, можно сказать, является аналогичным случаю с возмущенными экваториальными орбитами, и, следовательно, годограф мало отличается от окружности. Для $E > 1$ были рассмотрены орбиты, приходящие из бесконечности и улетающие обратно на бесконечность. Чтобы понять, какие формы будут у таких орбит, сперва нужно найти множество параметров, отвечающих за нужный нам режим. Другими словами, нужно найти набор таких параметров (L, Q) при заданном E и a, при которых у $R(r)$ будет двукратный корень, а это в свою очередь означает, что $\Delta^* = 0$ [4], где

$$\Delta^* = 256a_*^3e^3 - 192a_*^2bde^2 - 128a_*^2c^2e^2 + 144a_*^2cd^2e - 27a_*^2d^4 +$$
$$+ 144a_*b^2ce^2 - 6a_*b^2d^2e - 80a_*bc^2de + 18a_*bcd^3 + 16a_*c^4e - \qquad (7)$$
$$- 4a_*c^3d^2 - 27b^4e^2 + 18b^3cde - 4b^3d^3 - 4b^2c^3 + b^2c^2d^2,$$

а a_*, b, c, d, e – коэффициенты полинома $R(r)$. С помощью численных результатов можно найти параметры, при которых годограф максимально отклоняется от окружности (рис. 1), эти годографы являются окружностями с биениями и представляют с собой нутацию полного углового момента (рис. 2) и хорошо аппроксимируются нутационной функцией $R^2 + r^2 + 2Rr\cos(\gamma\Delta\Omega + \Delta\psi)$ (рис. 3).

Таким образом, для большинства орбит сохраняется понятие прецессии Лензе–Тирринга, а максимальное отклонение дает нутационный вклад.

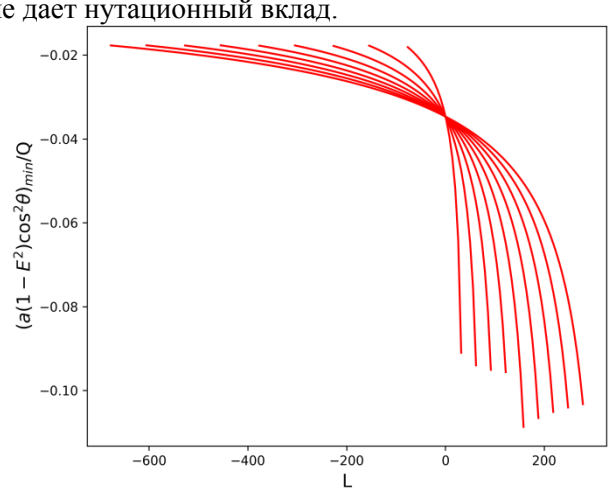


Рис. 1. Отношение $\Delta Q_{\max}$ к Q для разных проекций углового момента на ось вращения L_z

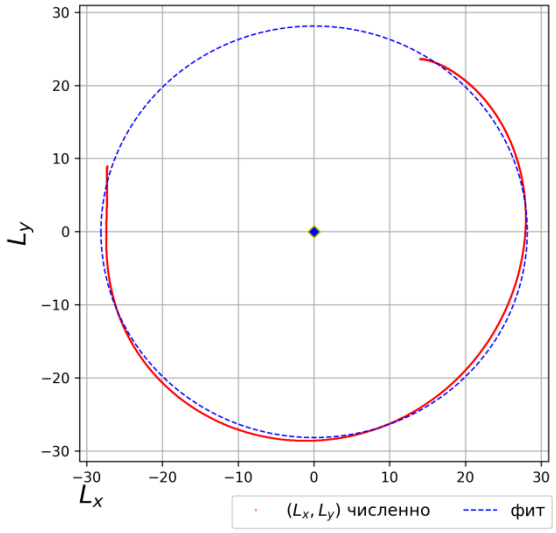


Рис. 2. Годограф отклоняющиейся от окружности.
$r = 0.634$, $\theta = 1.40$, $a = 0.9$, $E = 56.0$, $L = 158.317$, $Q = 752.612$ – параметры орбиты

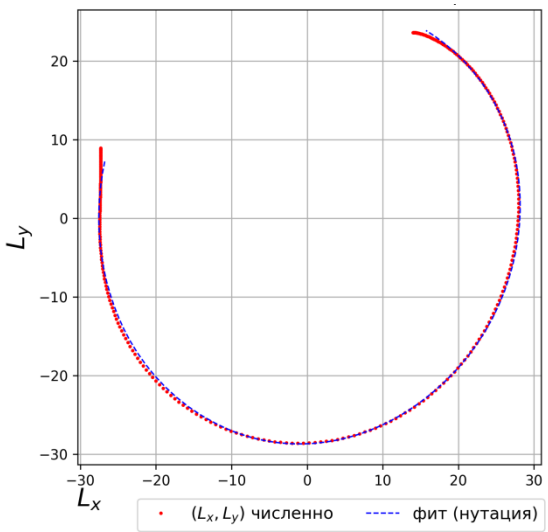


Рис. 3. Аппроксимация гадографа нутацией. $R = 28.194$, $r = 0.634$, $\Delta\Omega = 0.148$, $\Delta\psi = 2.386$ – параметры нутации

Литература

1. *Visser M.* The Kerr spacetime: A brief introduction // ArXiv e-prints. 2007.
2. *Чандрасекар С.* Математическая теория черных дыр. Т.2 М.: Мир, 1986
3. *Carter B.* Global Structure of the Kerr Family of Gravitational Fields // Physical Review. 1968 V.174(5). DOI 10.1103/physrev. 174.1559.
4. *Rees E.L.* Graphical discussion of the roots of a quartic equation // The American Mathematical Monthly. 1922.

СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Председатель: М.В. Фейгельман (д.ф.-м.н., член-корр. РАН, профессор)

Зам. председателя: В.Н. Зверев (д.ф.-м.н., доцент)

Секретарь: Д.С. Яковлев

Дата: 23.11.2018

Время: 10:00-16:00

Место: Черноголовка, Московская обл., ул. Акад. Осипьяна, д. 2, ауд. 115 магнитного корпуса ИФТТ РАН

УДК 53.043

Изучение свойств туннельных топологических джозефсоновских контактов

***А.Ю. Наумов*[1,2,3], *П.А. Иоселевич*[3,4]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН
[4]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Рассмотрена система, состоящая из двух одномерных сверхпроводников, соединенных туннельным контактом (см. рис. 1).

Одномерные сверхпроводники описываются следующим гамильтонианом:

$$h = \int dy \Psi^+(y) H(y) \Psi(y), \qquad \Psi^+(y) = (\psi_\uparrow^+ \ \psi_\downarrow^+ \ \psi_\uparrow \ -\psi_\uparrow),$$

$$H(y) = \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) \tau_z + up\sigma_z\tau_z + \Delta\left(\tau_x \cos\varphi(y) + \tau_y \sin\varphi(y) \right),$$

предложенным в работах [1] и [2]. Здесь τ_i и σ_i – матрицы Паули в спиновом и электрон-дырочном пространствах соответственно. u – параметр спин-орбитального взаимодействия, B – магнитное поле (зеемановский член). В зависимости от параметров B, Δ, μ, однородный сверхпроводник, описываемый H, может находится в тривиальной или топологической фазе. Нас интересует прежде всего случай, когда из двух сверхпроводников в джозефсоновском контакте один тривиальный, а второй – топологический. В этой ситуации на границе имеется топологически защищенное, связанное майорановское состояние [3] – дискретный уровень, энергия которого в точности равна нулю.

Проще всего такой контакт смоделировать гамильтонианом с зависящим от координаты потенциалом $\mu(y) = \text{const} - U(y)$, как показано на рис. 1. Похожая модель рассматривалась в [1] и [2], однако там отсутствовали туннельный барьер и разность сверхпроводящих фаз.

В общем случае найти спектр и волновые функции H для изучаемого контакта аналитически невозможно. Однако, если параметр u в сверхпроводниках велик (так что $mu^2 \gg B$, Δ, μ), возможно построить эффективную длинноволновую теорию, линеаризовав H [1]. Однако, вблизи и внутри высокого потенциального барьера такое приближение невозможно.

Учитывая вблизи барьера как длинноволновые (малый импульс), так и коротковолновые (большой импульс) компоненты волновых функций, мы получили граничные условия на волновую функцию по разные стороны барьера. Исключая из них быстрые волновые функции, мы получили эффективные граничные условия на медленные волновые функции, позволяющие успешно включить туннельный барьер в линеаризованную теорию. Граничное условие имеет следующий вид:

$$\left(1-2tT_x-\xi\partial_y\right)\begin{pmatrix}\Psi_{\text{Left}}\\ \Psi_{\text{Right}}\end{pmatrix},$$

$$1/\xi=\sqrt{2m|\mu_b|},\ t=e^{-L/\xi}\ll 1, T_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

где L – длина барьера. Используя это гранусловие, установлены свойства майорановского состояния в данной системе. Также оно позволяет определить свойства прочих дискретных уровней в системе. В частности, в пределе $t\to 0$ глубоко под щелью остается лишь одно состояние – майорановское.

В обычном туннельном контакте минимальный квант энергии, которую система может поглотить при низкой температуре – 2Δ , так как требуется разрушить одну куперовскую пару, создав две квазичастицы в континууме с энергией не менее Δ каждая. В топологическом контакте есть майорановское состояние с $E=0$. Система может поглотить квант δ, так как одна квазичастица окажется в континууме, а вторая квазичастица заполнит состояние с $E=0$. Так, например, при переменном напряжении с низкой частотой $\omega\ll\delta$, скорость поглощения энергии обычным контактом будет порядка $e^{-2\delta/\omega}$, а топологическим $e^{-2\delta/\omega}$, что гораздо больше. Это позволяет обнаружить майорановское состояние и отличить топологический контакт по скорости поглощения энергии в переменном поле.



Рис. 1. Координатная зависимость потенциала

Литература

1. *Oreg Y, Refael G, and von Oppen F.* Helical Liquids and Majorana Bound States in Quantum Wires // PRL. 2010. 105. 077001.
2. *Lutchyn R.M., Sau J.D. and Das Sarma S.* Majorana Fermions and a Topological Phase Transition in Semiconductor-Superconductor Heterostructures // PRL. 2010. 105. 077001.
3. *Kitaev A.Yu.* Unpaired Majorana fermions in quantum wires // Usp. Fiz. Nauk (Suppl.). 171 (10).

УДК 538.945

Хиральное взаимодействие, вызванное сверхпроводящим током

***Д.С. Рабинович*[1,2], *И.В. Бобкова*[3,1], *А.М. Бобков*[3], *М.А. Силаев*[4]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Институт физики твёрдого тела РАН
[4] Department of Physics and Nanoscience Center, University of Jyvaskyla

Взаимодействие между магнитными моментами является основополагающим фактором для всей физики конденсированного состояния, определяющим основные свойства магнитных материалов. На данный момент больше всего изучены парные обменные взаимодействия между магнитными моментами $\boldsymbol{m}_1$, $\boldsymbol{m}_2$. Обычное обменное взаимодействие $E = J_{ex}(\boldsymbol{m}_1\boldsymbol{m}_2)$ приводит к ферромагнитному или антиферромагнитному упорядочению, в зависимости от знака J_{ex}. В системах с нарушенной инверсионной симметрией можно получить асимметричный член Дзялошинского–Мория: $E = D_{1,2}(\boldsymbol{m}_1 \times \boldsymbol{m}_2)$ [1]. Однако все эти известные взаимодействия оказываются инвариантными по отношению к глобальному изменению намагниченности $E(\boldsymbol{m}) = E(-\boldsymbol{m})$. Эта симметрия приводит к фундаментальному вырождению по энергии между топологически отличными магнитными системами.

В данной работе показывается, что переносящие сверхток корреляции могут привести к дополнительному вкладу в энергию локализованных спинов, что приводит к нарушению симметрии по отношению к обращению намагниченности. Например, для системы трёх магнитных примесей $\boldsymbol{m}_1$, $\boldsymbol{m}_2$, $\boldsymbol{m}_3$ в сверхпроводнике этот вклад имеет вид $E_{ch} = E_a\boldsymbol{m}_1(\boldsymbol{m}_2 \times \boldsymbol{m}_3) = E_a\chi$, что возможно, только если множитель E_a меняет знак при обращении времени. Хотя существование $E_a \neq 0$ невозможно в нормальном состоянии, оно допускается в сверхпроводниках с движущимся конденсатом. Этот механизм взаимодействия фундаментально отличается от описанных ранее, так как он приводит к снятию вырождения по энергии между двумя состояниями с топологически отличными магнитными текстурами.

Далее описанный вклад в энергию рассматривается на примере двух S/F/S гетероструктур, где он приводит к возникновению магнитоэлектрического эффекта, который проявляется в виде аномального эффекта Джозефсона.

Было показано, что для S/F/S контакта через спиральный ферромагнетик толщиной d с намагниченностью в виде $\boldsymbol{m}(x) = h(\pm\boldsymbol{x}\cos\alpha + \sin\alpha(\boldsymbol{y}\cos\theta + \boldsymbol{z}\sin\theta))$, где $\theta(x) = x\theta'(x)$, $\alpha = \text{const}$ ток-фазовое соотношение приобретает вид

$$j = j_o \sin\varphi + j_a \cos\varphi, \tag{1}$$

что соответствует энергии Джозефсоновского перехода в виде

$$\frac{2eE_J}{\hbar} = \sqrt{j_o^2 + j_a^2} - j_o\cos\varphi + j_a\sin\varphi, \tag{2}$$

Причём знак аномального тока j_a определяется направлением вращения спирали. На рис. 1 представлена хиральная энергия контакта, и видно, что в зависимости от знака хиральности этот вклад принимает разные знаки. Таким образом, этот член снимает вырождение по энергии между системами с различными направлениями вращения спирали.

Также на рисунке представлены двумерные диаграммы для разности фаз и цветовая окружность, объясняющая цвета на диаграммах. На этих диаграммах видно, что в данной системе реализован φ-контакт: в основном состоянии разность фаз может принимать произвольное значение между 0 и π.

Из диаграмм видно, что в системе имеются области, соответствующие 0 и π состояниям (жёлтые и синие области, соответственно), а также два типа топологически неэквивалентных $0-\pi$ переходов, что соответствует двум путям обхода цветовой окружности: зеленые области соответствуют переходам через $\pi/2$, а красные – переходам через $3\pi/2$. Тип перехода определяется знаком аномального тока j_a, который зависит от h,θ',d, и изменяется при изменении знака j_a. На диаграммах чёрная штриховая линия соответствует $j_a=0$, и пересечения этой линии с линиями $j_o=0$ являются точками изменения типа перехода $I\leftrightarrow II$.

Ранее Джозефсоновский переход через спираль уже был рассмотрен [2], однако аномального эффекта получено не было. В данной работе для получения эффекта в систему были добавлены спин-поляризованные S/F и F/S границы [3].

Был рассмотрен S/F/S контакт через скирмион с намагниченностью $\boldsymbol{m}=(\cos\Phi(\theta)\sin\Theta(r),\sin\Phi(\theta)\sin\Theta(r),\cos\Theta(r))$, где (θ,r) – полярные координаты в плоскости (x,y), а сверхпроводники подключены в плоскостях $y=0,d$. Для такой системы было показано, что ток-фазовое соотношение и энергия также даются формулами (1), (2). Как и в предыдущей системе, равновесная разность фаз может принимать произвольное значение, отличное от πn в зависимости от положения центра скирмиона вдоль оси x. Возникновение аномального члена в энергии приводит к снятию вырождения между состояниями с разными топологическими зарядами $Q=\pm1$, и фиксированная разность фаз определяет, какой из топологических зарядов оказывается более выгодным. При этом в отсутствие пиннинга центр скирмиона с фиксированным зарядом будет перемещаться в положение, соответствующее минимальной энергии, которое определяется джозевсоновской разностью фаз. Таким образом, контролируя разность фаз, можно контролировать положение скирмиона в ферромагнетике.

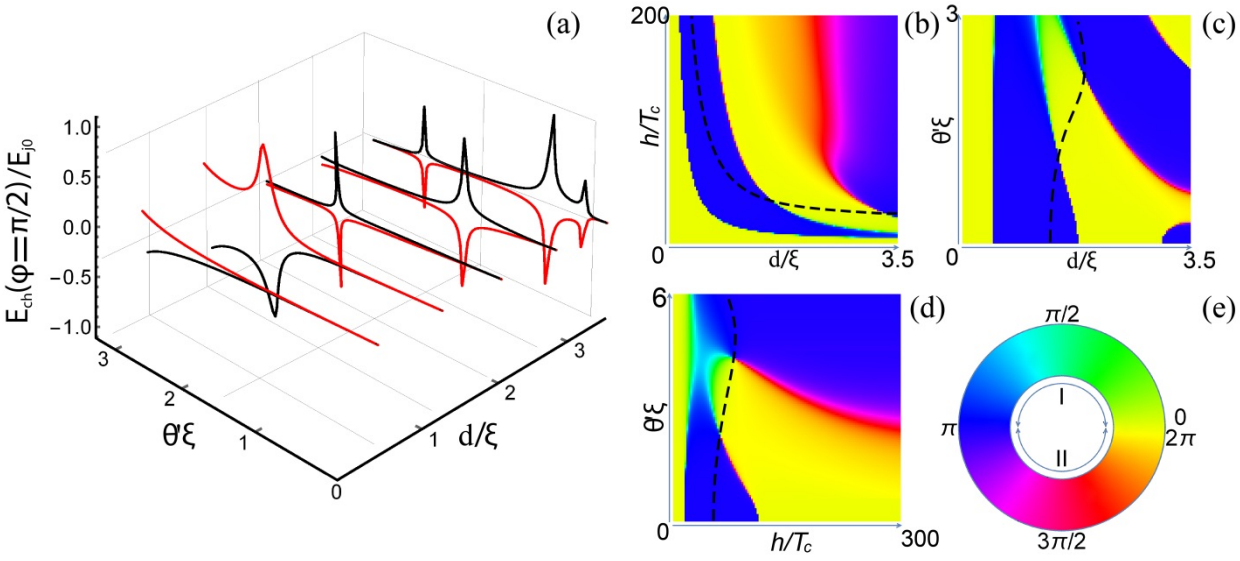


Рис. 1. (a) Хиральная энергия контакта $E_{ch}(\varphi=\pi/2)/E_{J0}$ для $\operatorname{sgn}\chi=+1$ (чёрные кривые), и $\operatorname{sgn}\chi=-1$ (красные кривые). (b) Разность фаз в основном состоянии как функция (h,d), $\theta'\xi=1$; (c) Разность фаз в основном состоянии как функция (θ',d), $h=40T_c$;(d) Разность фаз в основном состоянии как функция (h,θ'), $d=\xi$;(e) цветовая окружность, объясняющая цвета на диаграммах(b) – (d).

Литература

1. *Moriya T.*, Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism, Phys. Rev. 120, 91 (1960).
2. *Volkov A.F.*, [*et al.*]. Odd triplet superconductivity in a superconductor/ferromagnet structure with a spiral magnetic structure// Phys. Rev. B 73, 104412 (2006).
3. *Bergeret F. S.*, [*et al.*]. Spin-polarized Josephson and quasiparticle currents in superconducting spin-filter tunnel junctions //Phys. Rev. B 86, 060506 (2012).

УДК 538.945

Расширение коров сверхпроводящих вихрей в диффузном металле

***В.С. Столяров*[1,2,3,4], *T. Cren*[2], *Ch. Brun*[2], *И. Головчанский*[1,4], *О. Скрябина*[1,3], *Д. Касатонов*[1], *М. Хапаев*[1,5], *М.Ю. Куприянов*[1], *А. Голубов*[1,6], *Д. Родичев*[1,2,7,8]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Парижский институт нанонауки
[3]Институт физики твердого тела РАН
[4]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
[5]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
[6]Физико-технический факультет и MESA + Институт нанотехнологий
[7]Парижский научно-исследовательский университет
[8]Университет Сорбонны

Изучалась пространственная эволюция квантовых вихрей, возникающих в диффузной медной пленке толщиной 50 нм вследствие эффекта близости со сверхпроводящим слоем Nb толщиной 100 нм. Прикладывая магнитное поле перпендикулярно к границе Cu/Nb, мы создаем абрикосовские вихри в Nb и затем измеряем их влияние на туннельную локальную плотность состояний (LDOS) на поверхности Cu. Для того чтобы расширить наше понимание структуры квантовых вихрей внутри нормального металла, была разработана самосогласованная теоретическая модель, основанная на квазитрехмерном узаделевском формализме. Сочетание этой теории с поверхностно-чувствительным СТС-экспериментом дает полную микроскопическую картину пространственной и спектральной эволюции коров вихрей в диффузном металле.

Система уравнений Узаделя [1], описывающая поведение *S/N* бислоя в магнитном поле в цилиндрических координатах (r, z) (начало координат взято на *S/N* границе, ось *z* направлена по полю $\mathbf{H}$), имеет следующий вид:

$$\frac{d^2\theta_S}{dz^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\theta_S}{dr}\right)-(\Omega+Q^2\cos\theta_S)\sin\theta_S=-\Delta\cos\theta_S, \tag{8}$$

$$\frac{d^2\theta_N}{dz^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\theta_N}{dr}\right)-\frac{\Omega+k^2Q^2\cos\theta_N}{k^2}\sin\theta_N=0, \tag{9}$$

$$Q=\frac{1}{r}\left(1-\frac{r^2}{r_S^2}\right), \tag{10}$$

$$\Delta\ln t+2t\sum_{\Omega\geq 0}^{\infty}\left(\frac{\Delta}{\Omega}-\sin\theta_S\right)=0. \tag{11}$$

Здесь $\theta_{S(N)}$ – комплексные углы, связанные с локальной плотностью состояний в *S*(*N*)-слое как $N_{S(N)}=\mathrm{Re}(\cos\theta_{S(N)})$, $\Omega=(2n+1)t$ – мацубаровские частоты, $\xi_{S(N)}=\sqrt{\hbar D_{S(N)}/2\pi k_B T_c}$, ξ_S – эффективная сверхпроводящая длина когерентности, $D_{S(N)}$ – коэффициент диффузии в S(N), $k=\xi_N/\xi_S$, Q – радиальная компонента векторного потенциала $\mathbf{Q}=(0,Q,0)$, нормированная на $\Phi_0/2\pi\xi_S$, $t=T/T_c$ – приведенная температура, $r_S=R_S/\xi_S$ – приведенный радиус ячейки вихревой решетки. Потенциал пары Δ в (1) – (4) нормирован на $\pi k_B T_c$, а координаты r, z нормированы на ξ_S.

Уравнения (1) – (4) должны быть дополнены граничными условиями на *S/N* границе $(z=0)$:

$$\gamma_B k\frac{d\theta_N}{dz}=\sin\theta_N\cos\theta_S-\sin\theta_S\cos\theta_N, \tag{12}$$

$$\frac{d\theta_S}{dz}=\gamma k\frac{d\theta_N}{dz}, \tag{13}$$

где $\gamma_B = \frac{R_{SN} A_{SN}}{\rho_N \xi_N}$, $\gamma = \frac{\rho_S \xi_S}{\rho_N \xi_N}$ – коэффициенты, подавляющие сверхпроводящий параметр порядка при прохождении через границу *S/N* бислоя, R_{SN}, A_{SN} – сопротивление и площадь S/N границы соответственно, $\rho_{S(N)}$ – проводимость в нормальном состоянии *S*(*N*)-металла. На нижней границе S/Вакуум и на верхней границе *N*/Вакуум граничные условия имеют вид

$$\frac{d\theta_S(z=-d_S)}{dz} = 0, \frac{d\theta_N(z=d_N)}{dz} = 0. \quad (14)$$

Также на границе вихревой ячейки, $r = r_S$, и в центре, $r = 0$, имеем соответственно

$$\frac{d\theta_N(r_S)}{dr} = \frac{d\theta_S(r_S)}{dr} = 0, \theta_N(0) = \theta_S(0) = 0. \quad (8)$$

Задача (1) – (8) была решена численно модифицированным методом Ньютона [2]. На рис. 1 представлены результаты вычислений в сравнении с данными, полученными экспериментально. Результаты моделирования хорошо совпали с экспериментальными данными, что говорит о корректности построенной нами теоретической модели.

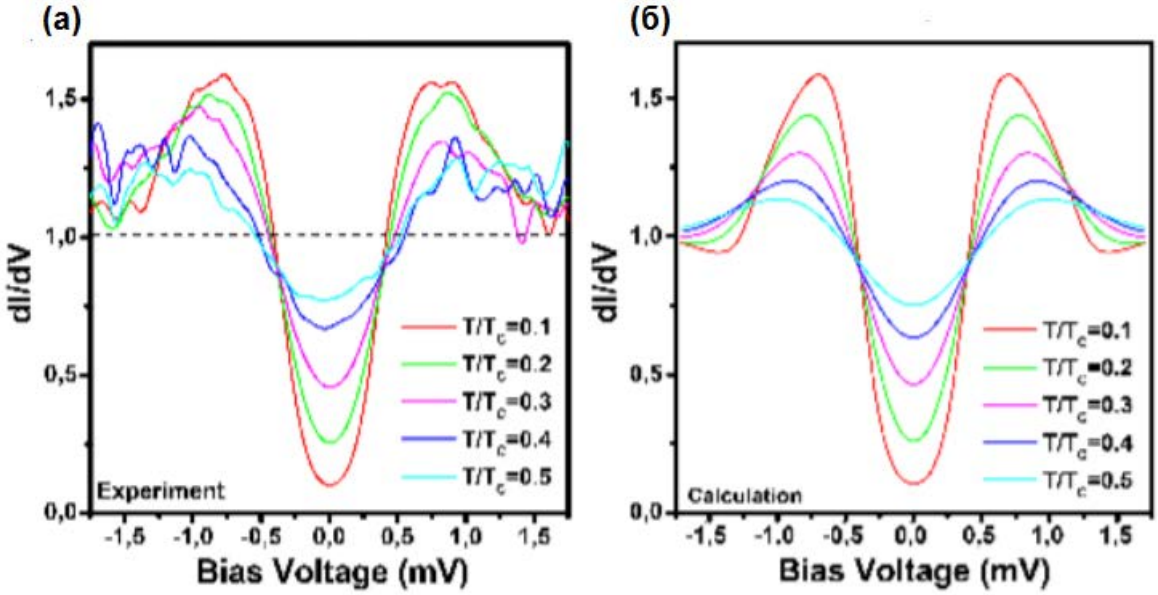


Рис. 1. (а) экспериментальные dI/dV спектры, полученные при различных температурах; (б) приближение данных (а) с использованием узаделевской модели

Литература

1. *Usadel, K.D.* Generalized diffusion equation for superconducting alloys // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 25. P. 507.
2. *Hecht, F.* New development in freefem++ // J. Numer. Math. 2012. V. 20. P. 251.

УДК 538.945

Необычное проявление сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма в железосодержащем пниктиде $RbEuFe_4As_4$

***А.С. Астраханцева*[1], *С.Ю. Гребенчук*[1], *Д.С. Баранов*[1,3], *И.А. Головчанский*[1], *В.В. Дремов*[1], *Л.Я. Винников*[2], *Д.Ю. Родичев*[1,3,4], *В.С. Столяров*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт физики твердого тела РАН
[3]LPEM, ESPCI Paris, PSL Research University
[4]Sorbonne Université

Хорошо известно, что сверхпроводимость и ферромагнетизм – это явления антагонисты. Показательными примерами сосуществования этих двух явлений были исследования решетки ферромагнитных островков на поверхности сверхпроводника [1] и изучение гибридных структур из сверхпроводника и ферромагнетика [2]. Относительно недавно появился новый класс веществ, в котором сверхпроводимость и ферромагнетизм сосуществуют одновременно на атомном уровне (например, [3,4]). Объектом исследований данной работы был слоистый монокристалл $RbEuFe_4As_4$ с продольной (плоскостной) магнитной анизотропией. Исследования проводились на низкотемпературном магнитно-силовом микроскопе. Температура сверхпроводящего перехода данного образца T_{sc}=36.25 K, а температура Кюри T_c=15 K [5, 6].

В работе было исследовано влияние температуры на распределения локального магнитного поля над поверхностью кристалла в постоянном внешнем магнитном поле при уменьшении температуры (см. рис. 1). На рис. 1a мы наблюдаем решетку вихрей Абрикосова свойственную сверхпроводникам второго рода, соответствующую внешнему приложенному полю 33 Гс, без каких-либо особенностей. На рис. 1b мы можем заметить появление черных точек между вихрями, которые мы идентифицируем как антивихри. На рис. 1b–d видно, что антивихри расположены не однородно, а в областях с темным (против светлых областей, в которых нет антивихрей) контрастом. Светлые и темные области формируют домены, которые мы разделили белыми пунктирными линиями. Также на рис. 1c выделены желтой пунктирной линией области, в которых вихри и антивихри взаимно уничтожились, а на рис. 1d эти области снова заполнены вихрями.

Для серии экспериментов в постоянном внешнем магнитном поле мы проанализировали вихревую решетку и построили: температурную зависимость углов между прямыми, соединяющими центры вихрей (см. рис. 2a); температурную зависимость расстояний между вихрями (см. рис. 2b); температурную зависимость концентрации вихрей (см. рис. 2c). На рис. 2a мы можем наблюдать небольшое уменьшение значений типичных углов, что отражает изменение числа и позиций вихрей. На рис. 2b мы видим резкое увеличение средних расстояний между вихрями в температурном диапазоне от 10 K до 14 K. На рис. 2c наблюдается скачок уменьшения приведенной концентрации вихрей в том же температурном диапазоне, что согласуется с увеличением расстояний между вихрями и процессом аннигиляции вихрей.

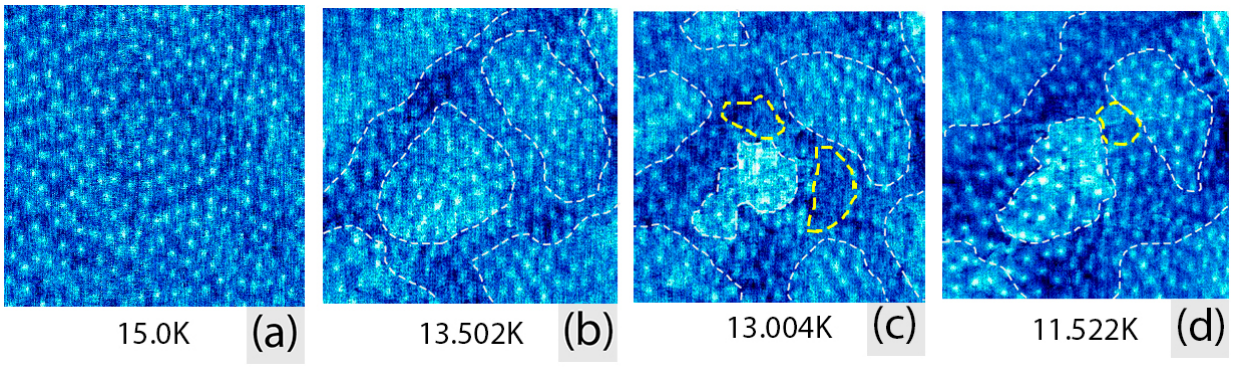


Рис.1. Фазовые портреты поверхности образца в постоянном внешнем поле H = 30 Гс при температурах (a) 15 K, область сканирования 12.4 × 12.4 μm^2, (b) 13.5 K, область сканирования 12.2 × 12.2 μm^2 , (c) 13 K, область сканирования 12.1 × 12.1 μm^2, (d) 11.5 K, область сканирования 11.9 × 11.9 μm^2 (координаты центра скана для (a), (b), (c) и (d) изображений постоянны)

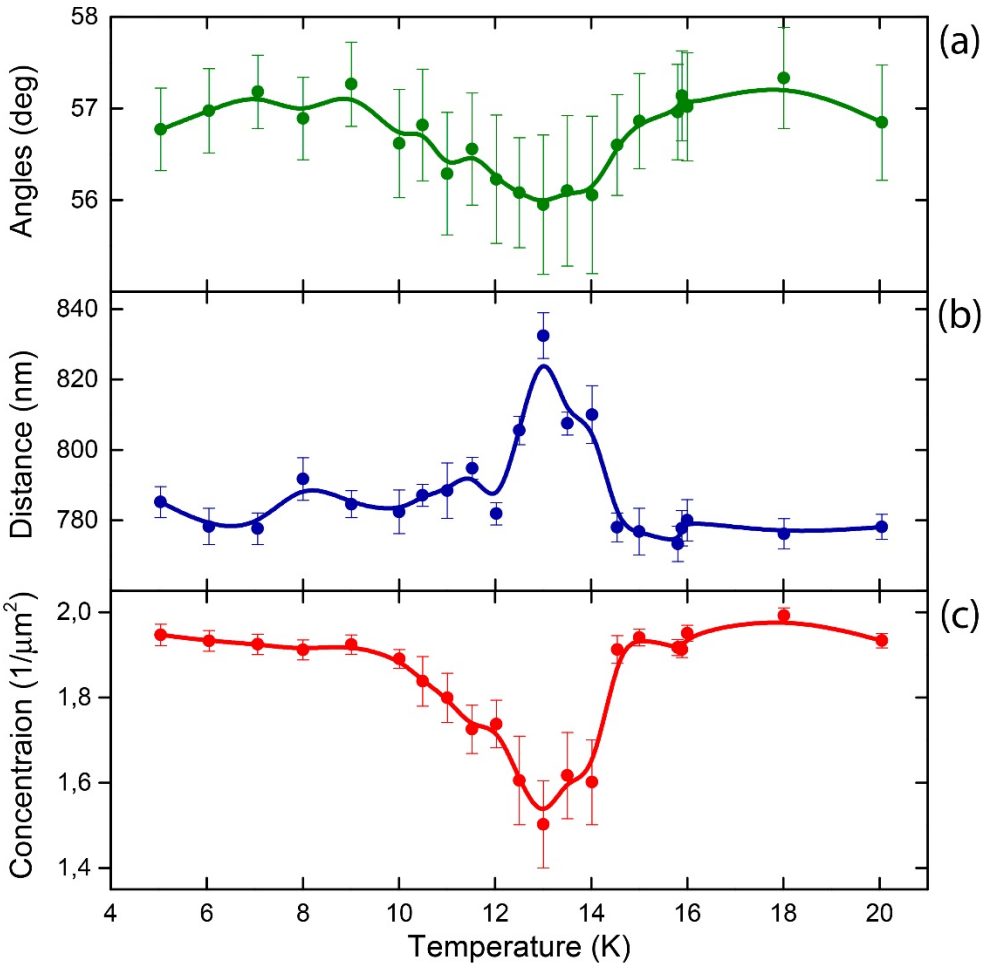


Рис. 2. (a) Температурная зависимость углов между прямыми, соединяющими центры вихрей; (b) температурная зависимость расстояний между вихрями; (c) температурная зависимость концентрации вихрей

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №18-72-10118.

Литература

1. *Martin J.I., Velez M., Hoffman A., Schuller I.K., and Vicent J.L.* // Phys. Rev. Lett. 1999. 83.1022.
2. *Bobba F., Di Giorgio C., Scarfato A., Longobardi M., Iavarone M., Moore S. A., Karapetrov G., Novosad V., Yefremenko V., and Cucolo A. M.* // Phys. Rev. B. 2014. 89. 214502.
3. *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., Sun Yue, Jiao Wenhe, Cao Guanghan, Tamegai T., Golubov A.A.* // JETP Letters. 2017. V. 105, Iss. 2, P. 98–102.
4. *Stolyarov V.S.*, [*et al.*]. // Science Advances. 2018. 4. N 7, eaat1061 (2018)
5. *Yi Liu, Ya-Bin Liu, Zhang-Tu Tang, Hao Jiang, Zhi-Cheng Wang, Abduweli Ablimit, Wen-He Jiao, Qian Tao, Chun-Mu Feng, Zhu-An Xu, and Guang-Han Cao* // Phys. Rev. B. 2016. 93. 214503.
6. *Stolyarov V.S.* [*et al.*]. Unique interplay between superconducting and ferromagnetic orders in $EuRbFe_4As_4$ // Phys. Rev. B(R)(https://arxiv.org/pdf/1807.04135.pdf). 2018.

УДК 53.05

Реализация трёхкубитной схемы на трансмонах

***И.А. Цицилин*[1,2], *И.С. Беседин*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Для реализации квантовых вычислений необходимо использование большого числа взаимодействующих кубитов. В связи с этим был разработан дизайн (рис. 1), потенциально являющийся отправной точкой для дальнейшего масштабирования кубитных систем. После его изготовления была проведена серия спектроскопических измерений в микроволновом диапазоне, позволяющая получить основные его характеристики.

Гамильтониан цепочки из трех кубитов-трансмонов, связанных ёмкостным способом между собой, в двухуровневом приближении может быть записан как

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \hat{H}_q + \hat{H}_{qr} + \hat{H}_{qq},$$

$$\hat{H}_r = \sum_{i=1}^{3} \hbar\omega_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i, \hat{H}_q = \sum_{i=1}^{3} \frac{\hbar\omega_i}{2} \hat{\sigma}_{z_i}, \hat{H}_{qr} = \sum_{i=1}^{3} \hbar g_i (\hat{a}_i^+ \hat{\sigma}_i^- + \hat{a}_i^- \hat{\sigma}_i^+), \hat{H}_{qq} = \sum_{i \neq j}^{3} J_{ij} \hat{\sigma}_{x_i} \hat{\sigma}_{x_j}, \quad (1)$$

Из зависимости эффективной частоты резонатора от внешнего потока (рис. 2) можно получить величину связи между кубитами и резонаторами – $g_i \approx 40$МГц , если аппроксимировать данные по формуле

$$f_{result} = \frac{1}{2}(f_r^2 + f_q^2 \pm \sqrt{(f_r^2 - f_q^2)^2 + 16 g^2 f_r f_q}), \quad (2)$$

где частота кубита зависит от внешнего потока.

Поиск связи между кубитами проводился при помощи исследования зависимости частоты кубитов от внешнего магнитного потока. На месте пересечения дисперсионных зависимостей невзаимодействующих кубитов в случае наличия связи возникает щель (Рис.3). Её величина составила $2J$ = 54 МГц.

Помимо величин, входящих в гамильтониан (1), немаловажными являются следующие параметры – времена свободного затухания и когерентности кубитов – T_1, T_2. Их значение определяется рядом факторов, в том числе величиной связи между кубитами, кубитом и резонатором, кубитом и RF-, DC-линиями. После оптимизации связи между структурами были получены кубиты с характерными временами релаксации, как на рис. 4.

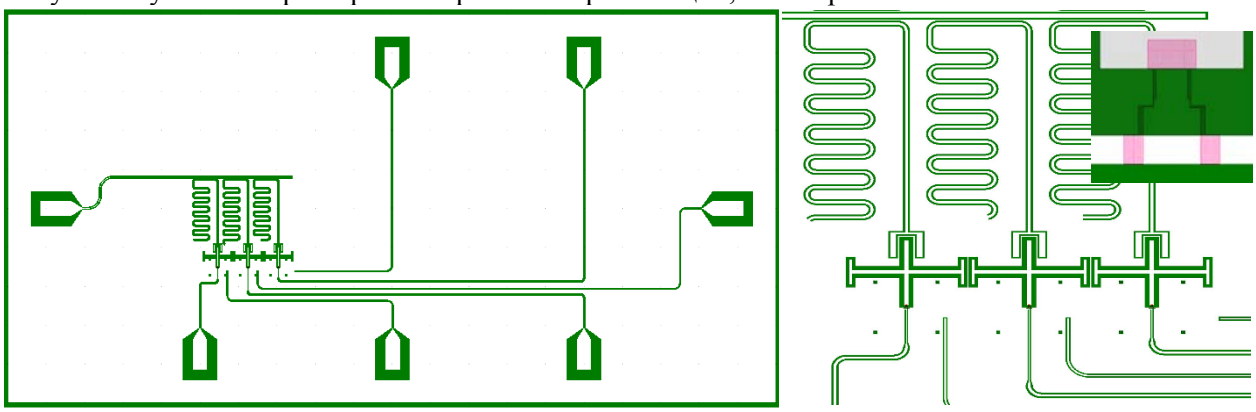


Рис. 1. Дизайн чипа, содержащий линию передачи, резонаторы, перестраиваемые по потоку кубиты, RF-линии возбуждения и DC-линии потока. На вставке розовым цветом показан ассиметричный СКВИД, используемый в качестве нелинейной индуктивности

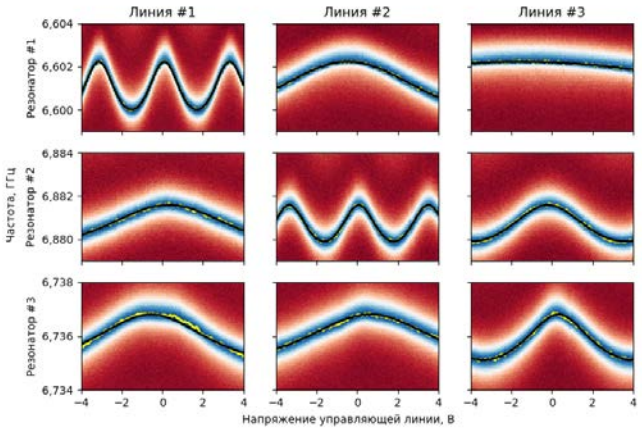


Рис. 2. Зависимость частоты резонатора от внешнего поля, создаваемого различными DC-линиями на чипе

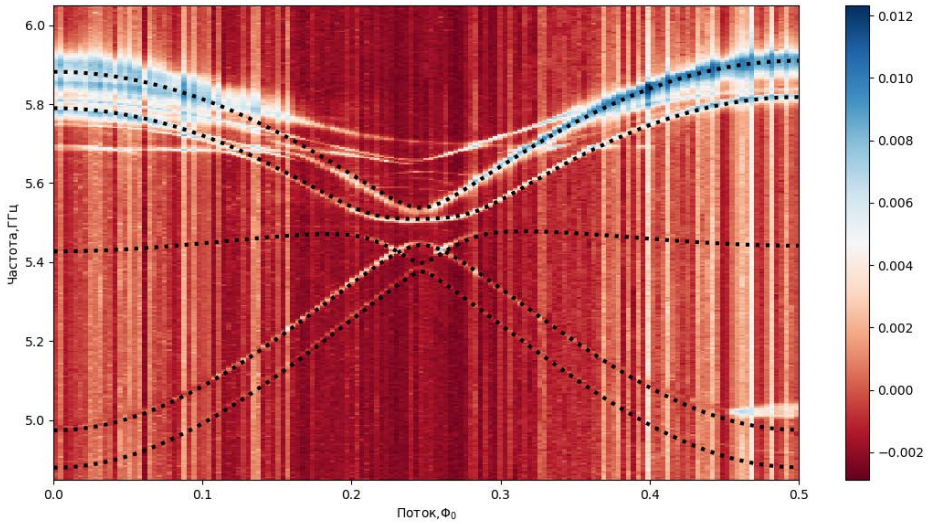


Рис. 3. Зависимость частоты кубитов от внешнего поля. Чёрным пунктиром показаны результаты численного расчета спектра двухкубитного гамильтониана

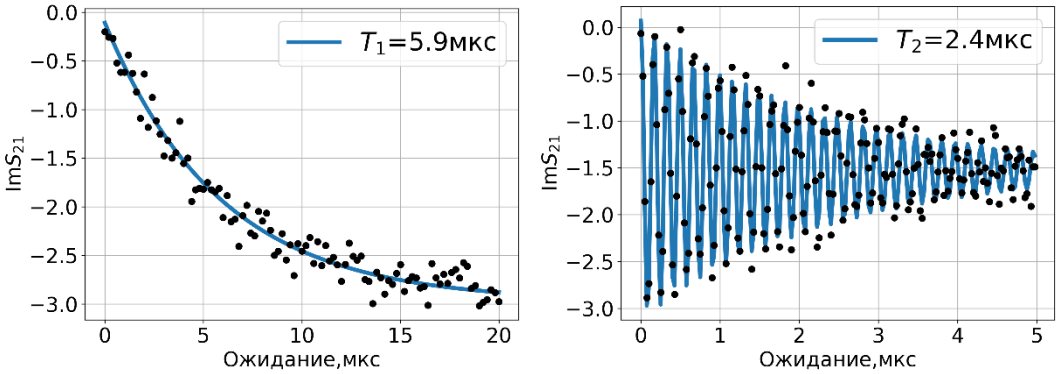


Рис. 4. Слева – свободное затухание, справа – Рамзей-осцилляции

Литература

1. *J. Koch* [*et al.*] Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box (2007).
2. *R. Barends* [*et al.*] Coherent Josephson qubit suitable for scalable quantum integrated circuits (2013).

УДК 538.945

Генерация джозефсоновских вихрей локальным магнитным полем кантилевера МСМ

***С.Ю. Гребенчук*[1,2], *В.С. Столяров*[1,3,5], *В.В. Дремов*[1,3], *Д.С. Баранов*[1,3,4], *Оганнисян Р.А.*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Институт физики твердого тела РАН
[4]Laboratoire de physique et d'etude des materiaux, ParisTech-UPMC
[5]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

При исследовании топографии СНС-контакта (сверхпроводник–нормальный металл–сверхпроводник) с помощью низкотемпературного магнитно-силового микроскопа (МСМ) были замечены неожиданные сигналы в фазе кантилевера (рис. 1a). Эти отклики проявляются в виде полуколец. Мы предполагаем, что эти полукольца являются геометрическим местом точек в пространстве, в которых осциллирующий кантилевер создает вихрь Джозефсона в слабой связи. Неоднородное магнитное поле иглы взаимодействует с мейсснеровскими токами сверхпроводящих контактов, и в некоторых местах магнитное поле достаточно велико, чтобы появлялся джозефсоновский вихрь. Из-за локального изменения магнитного поля в связи с колебаниями иглы джозефсоновские вихри входят и выходят из слабой связи СНС-контакта, порождая переменное электромагнитное поле на частоте кантилевера. Такое резонансное взаимодействие вызывает провалы фазы кантилевера, которые проявляются как полукольца на МСМ-изображении.

Мы исследовали корреляцию между сигналом от кантелевера и фраунгоферовской зависимостью критического тока от внешнего магнитного поля для СНС-контакта в присутствии иглы (рис. 1b). Фазовый сдвиг колебания кантилевера измерялся при его неизменном положении при изменении внешнего магнитного поля (верхний график на рис. 1b). При изменении внешнего магнитного поля местоположение полуколец изменяется, что и вызывает резкие провалы в фазе колебания кантилевера, когда позиции полуколец совпадают с позицией кантилевера. Одновременно измерялась зависимость критического тока от внешнего магнитного поля (нижний график на рис. 1b). При этом фраунгоферовская зависимость сильно изменилась в присутствии магнитного кантилевера, но её период по полю при этом не изменился. Как видно из рис. 1b, зависимость фазы колебания кантилевера от магнитного поля коррелирует с графиком Фраунгофера (пунктирные вертикальные линии на рис. 1b).

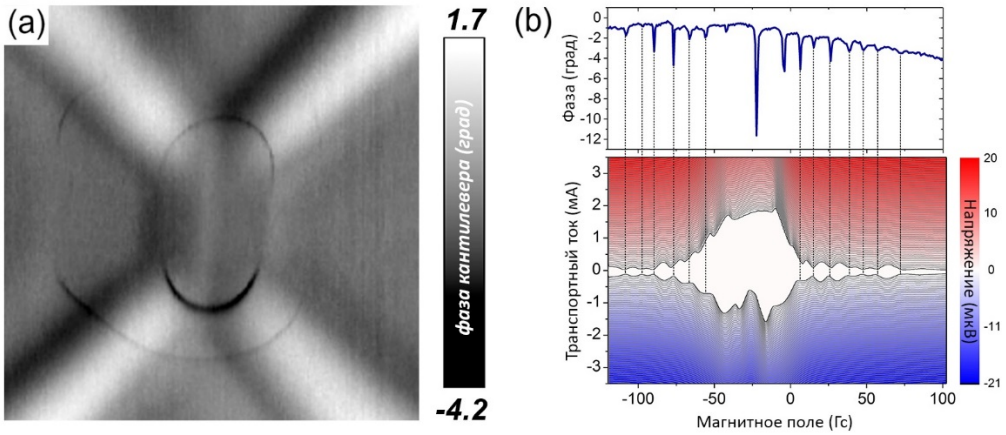


Рис. 1. (a) – МСМ-изображение изменения фазы колебания кантилевера при исследовании СНС-контакта с расстоянием 60 нм между образцом и кантилевером.; (b) – фазовый сдвиг кантилевера (верхний график) и Фраунгофер для SNS-контакта в присутствии магнитного кантилевера (игла находится над электродом возле границы слабой связи). Пунктирные вертикальные линии показывают корреляцию между двумя различными зависимостями

Литература

1. *Roditchev D., Brun C., Serrier-Garcia L., Cuevas J. C., Bessa V. H. L., Milosevic M. V., Debontridder F., Stolyarov V., and Cren T. //* Nat. Phys. 2015. 11. 332.

УДК 538.935

Неборновские эффекты в рассеянии электронов в чистой проводящей трубке

А.С. Иоселевич[1,2]***, Н.С. Пещеренко***[3,4]

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт теоретической физики имени Л.Д. Ландау РАН
[3]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[4]Сколковский институт науки и технологий

Плотность состояний и сопротивление проводящей трубки (радиусом R) в магнитном поле без примесей обладает особенностями Ван Хова в силу своей квазиодномерности. Как было показано в [1], учёт рассеяния замывает эту расходимость. Однако результаты работы [1] оказываются применимы лишь для случая $n >> n_c$, где n – концентрация примесей, n_c – некоторая критическая концентрация, которая будет найдена ниже. Сопротивление трубки во всех случаях вычисляется по формуле Кубо, n (концентрация, измеренная в единицах R^{-2}) и λ (безразмерная амплитуда рассеяния на одной примеси) предполагаются малыми: $n, |\lambda| << 1$.

Вычисляя сопротивление в борновском приближении вдали от особенности Ван Хова, получим следующие ответы:

$$\nu_0 = mR, \quad \rho_0 = \frac{1}{e^2 \varepsilon_F} \frac{1}{\tau_0}, \quad \frac{1}{\tau_0} = 2n \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^2 . \tag{1}$$

Здесь τ_0, ν_0, ρ_0 – квазиклассические время рассеяния, плотность состояний и сопротивление соответственно. При приближении уровня Ферми к дну зоны выражение для плотности состояний изменяется:

$$\nu(\varepsilon) = \nu_0 \left(1 + \frac{\theta(\varepsilon)}{\pi \sqrt{\varepsilon}} \right), \quad \frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{1}{\tau_0} \frac{\nu(\varepsilon)}{\nu_0}. \tag{2}$$

Находя ширину пика из условия $\tau^{-1}(\varepsilon \sim \Gamma_{\text{В}}) \sim \Gamma_{\text{В}}$, получим:

$$\Gamma_{\text{В}} \sim \left(\frac{n}{\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{4/3} >> \frac{1}{\tau_0}, \quad \rho_{\text{В}}^{\max} \sim \frac{1}{e^2 \varepsilon_F} \left(\frac{n}{\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{4/3} >> \rho_0. \tag{3}$$

Учтём теперь неборновские эффекты в сопротивлении. Перенормированная амплитуда рассеяния находится из уравнения Дайсона:

$$\lambda \to \Lambda(\varepsilon) \approx \lambda \left\{ 1 - \frac{\Lambda_{2d}}{\pi \sqrt{\varepsilon}} \right\}^{-1} . \tag{4}$$

Здесь $\Lambda_{2d} = \lambda e^{-i \arcsin \lambda}$ – точная амплитуда рассеяния на двумерной плоскости, λ – её параметризация. Таким образом, энергетический масштаб, связанный с неборновскими эффектами, есть $\varepsilon_{\text{nB}} = (\lambda/\pi)^2 << 1$. Другими словами, в окрестности особенности Ван Хова неборновские эффекты важны даже в случае слабого рассеяния ($|\lambda| << 1$). Сравнивая Γ_B и ε_{nB}, находим критерий «неборновского» режима:

$$n < n_c, \quad n_c = |\lambda| / \pi . \tag{5}$$

Сопротивление для $\varepsilon > 0$ не зависит от знака λ, что не так для $\varepsilon < 0$. $\rho(\varepsilon > 0)$ достигает максимума с шириной $\Gamma_{\text{nB}}^{(+)} \propto \varepsilon_{\text{nB}}$ при $\varepsilon_{\max} = \varepsilon_{\text{nB}}$. Поведение сопротивления (рис. 1) описывается формулой

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = 2 \left(\frac{n}{\pi} \right) \left(\frac{\lambda}{\pi} \right) F(\varepsilon / \varepsilon_{\text{nB}}), \quad F(z) = \left(z^{1/2} + z^{-1/2} \right)^{-1}. \tag{6}$$

Значение в максимуме $\rho_{\text{nB}}^{\max(+)} = \dfrac{2}{e^2\varepsilon_F}\left(\dfrac{n}{\pi}\right)\left(\dfrac{\lambda}{\pi}\right)^2 F_{\max} << \rho_{\text{B}}^{\max}$. Для отталкивающих примесей в случае $\varepsilon < 0$ получаем:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = 2\pi\left(\frac{n}{\pi}\right)\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^2 \tilde{F}\left(\varepsilon/\varepsilon_{\text{nB}}\right), \quad \tilde{F}(z) = \left(1+\left(-z\right)^{-1/2}\right)^{-2}. \tag{7}$$

В случае притягивающих примесей перенормированная амплитуда рассеяния $\Lambda(\varepsilon)$ имеет полюс в точке $\varepsilon = \left(-1+2i|\lambda|\right)\varepsilon_{\text{nB}}$, что соответствует квазистационарному состоянию. Физическая природа явления следующая: при малых продольных скоростях траектория электрона почти замкнута. Таким образом, мимо притягивающей примеси электрон проходит много раз и таким образом возникает квазисвязанное состояние. Поведение сопротивления задается той же формулой (7), но с другой функцией $F\left(\varepsilon/\varepsilon_{\text{nB}}\right)$:

$$F(z) \approx \begin{cases} \left(1-|z|^{-1/2}\right)^{-2}, & \left|1-|z|\right| >> |\lambda| \\ \dfrac{4}{\left(1-|z|\right)^2+4\lambda^2}, & \left|1-|z|\right| \approx |\lambda| \end{cases} \tag{8}$$

Максимум $\rho_{\text{nB}}^{\max(-)} \sim \dfrac{1}{e^2\varepsilon_F}\dfrac{2n}{\pi^2}$ шириной $\Gamma_{\text{nB}}^{(-)} = 4|\lambda|\varepsilon_{\text{nB}}$ достигается при $\varepsilon = -\varepsilon_{\text{nB}}$.

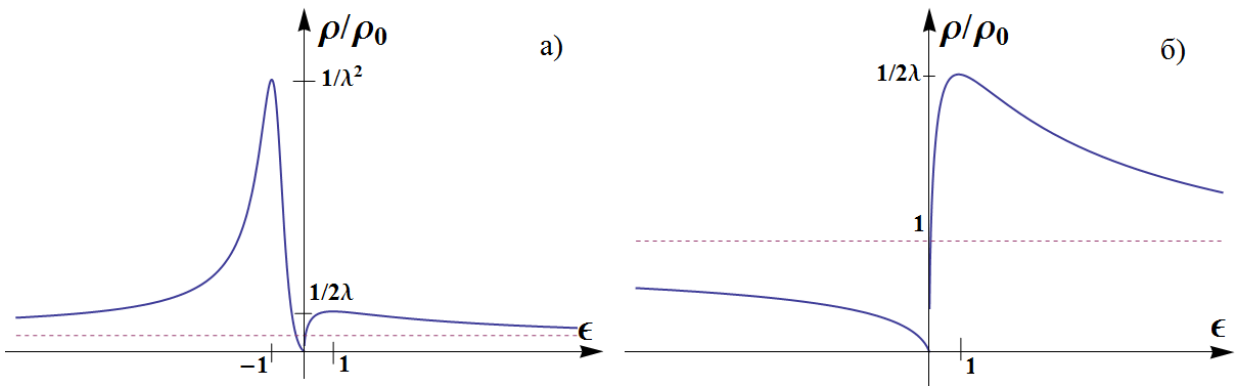


Рис. 1. Неборновское сопротивление $\rho(\varepsilon)$ как функция химпотенциала ε для а) притягивающих примесей ($\lambda < 0$) и б) отталкивающих примесей ($\lambda > 0$)

Литература

1. *Hügle S., Egger R.* Van Hove singularities in disordered multichannel quantum wires and nanotubes // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 193311.

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

Председатель: А.Ф. Андреев (д.ф.-м.н., академик РАН, профессор, зав. кафедрой)

Зам. председателя: А.И. Смирнов (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: Т.А. Солдатов

Дата: 22.11.2018

Время: 15:00-17:00

Место: Москва, ул. Косыгина, д. 2, Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН

УДК 536.587:536.511

Система стабилизация температуры резонатора акустического газового термометра

С.М. Осадчий, Б.Г. Потапов, А.А. Петухов, К.Д. Пилипенко

Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений

В связи с переходом на новое определение единицы температуры кельвина планируется включить акустический газовый термометр в состав Государственного первичного эталона единицы температуры – кельвина в диапазоне 0,3–273,16 К (ГЭТ 35–2010). В акустическом газовом термометре термодинамическая температура определяется по законам газовой термодинамики и не связана непосредственно с термометрией сопротивлений. Основные принципы акустической газовой термометрии и описание конструкции акустического газового термометра изложены в работах [1–3] .

Универсальная газовая постоянная, постоянная Больцмана k_B и скорость звука u_s в идеальном одноатомном газе при температуре T связаны соотношением:

$$T = \frac{3}{5}\frac{M}{N_A k_B} u_{s,0}^2 \quad ,$$

где M – молярная масса газа; N_A – число Авогадро, где $u_{s,0} = \lim_{p\to 0} u_s(p)$ – предел скорости звука при давлении, стремящемся к нулю. Скорость звука вычисляется по измеренной частоте акустического резонанса в сферическом резонаторе. На рис. 1 показан акустический газовый термометр, в который входят вакуумная камера с камерой давления и резонатором. Резонатор расположен в камере давления, которая заполняется гелием. Температура резонатора регулируется нагревателем, расположенным на теплообменнике.

В систему регулировки температуры резонатора акустического термометра входят термометры сопротивления. Для точных измерений термодинамической температуры резонатор акустического термометра поддерживается системой регулировки при постоянной температуре с высокой точностью на время измерения частотных зависимостей акустического резонанса.

Применение нового разработанного в ВНИИФТРИ прибора – термоконтроллера АК-10 в системе регулировки и стабилизации температуры резонатора акустического газового термометра позволило улучшить характеристики этой системы. Измерения температуры резонатора с помощью моста MI6020T показывают возможность стабилизации температуры на уровне 15 мкК. График флуктуации температуры резонатора во времени при его стабилизации с использованием термоконтроллера АК-10 приведен на рис. 2.

Система регулировки температуры резонатора предусматривает подогрев теплообменника. Из-за этого возникает перепад температур между верхней и нижней полусферами резонатора, сравнимый с неопределенностью калибровки термометров, установленных в полусферах. Для корректного определения перепада температур реализована следующая схема измерений. Регулятор температуры резонатора отключался, и резонатор выдерживался в термостате в течение суток. Разница показаний термометров верхней и нижней полусфер $d_0 = T_в - T_н$ соответствовала пренебрежимо малому градиенту. Затем регулятор включался, и устанавливалась новая разница показаний d_1. Разность $d_1 - d_0$ соответствовала температурному перепаду между верхней и нижней полусферами при включённой регулировке. Эта процедура позволила оптимизировать температуру стабилизации термостата и резонатора, при которых перепад температур по резонатору составил 0,1 мК, что эквивалентно относительной неопределённости воспроизведения температуры 0,22 млн$^{-1}$. Бюджет неопределённости температурных измерений приведён в таблице.

Суммарная стандартная относительная неопределенность температурных измерений при передаче температуры от резонатора к термометру сопротивления составила 0,25 млн$^{-1}$, что соответствует уровню, достигнутому в ведущих национальных метрологических институтах.

Таблица 1

Источники и составляющие неопределённости	Стандартная неопределённость, млн$^{-1}$
Градиент температуры резонатора	0,22
Измерительный мост MI6020T	0,015
Мера сопротивления	0,1
Суммарная стандартная неопределённость температурных измерений	0,25

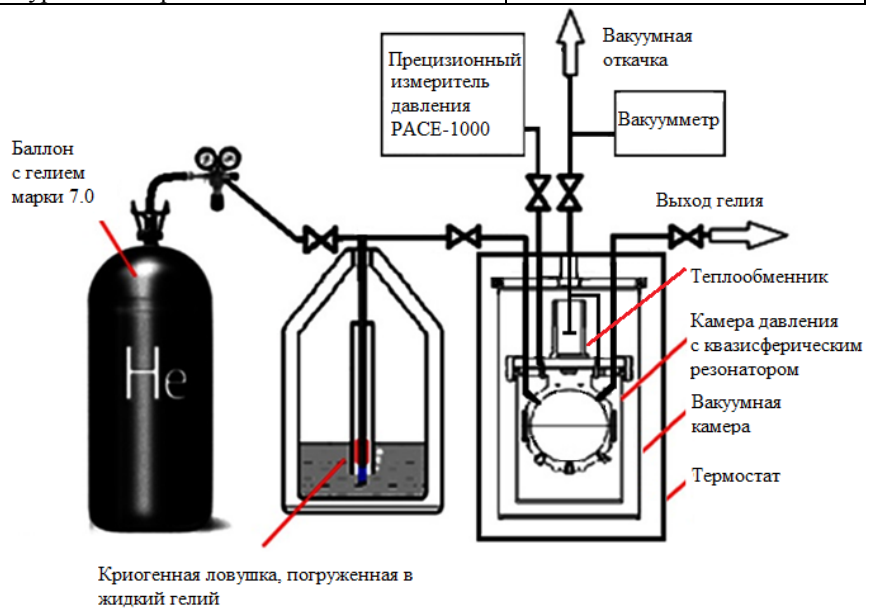


Рис. 1. Акустический газовый термометр

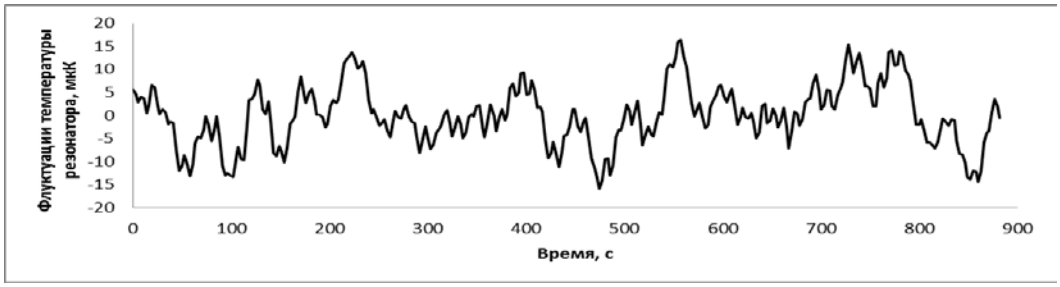


Рис.2 График флуктуации температуры резонатора во времени при его стабилизации с использованием термоконтроллера АК-10

Литература

1. *Осадчий С.М., Потапов, Б.Г. Пилипенко, К.Д., Асланян Э.Г., Щипунов А.Н.* Измерение постоянной Больцмана в квазисферическом акустическом резонаторе // Измерительная техника. 2017. № 7. С. 8–13.
2. *Осадчий С.М., Потапов Б.Г., Пилипенко К.Д.* Акустический газовый термометр для реализации нового определения кельвина на основе фундаментальной физической константы Больцмана // Альманах современной метрологии. 2017. № 12. С. 15–42.
3. *Осадчий С.М., Потапов Б.Г., Петухов А.А., Соколов Н.А., Драгунов О.Э., Пилипенко К.Д.* Стабилизация температуры резонатора в акустическом газовом термометре // Измерительная техника. 2018. №9. С. 54–57.

УДК 53.082.6

Быстродействие низкотемпературных приемников с СИНИС болометром на частоте 350 ГГц

С.А. Лемзяков

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

В работе при температуре 100 мК изучалась постоянная времени отклика на излучение частотой 350 ГГц приемников на основе туннельных структур сверхпроводник-изолятор-нормальный металл–изолятор–сверхпроводник (СИНИС-структуры), которые были интегрированы в плоскостную логопериодическую антенну[1, 2], в матрицы параллельно включенных кольцевых антенн и матрицы метаматериалов.

Переходные характеристики приемника (в виде отклика по напряжению при постоянном токе) регистрировались при облучении болометров быстрым криогенным источником излучения со временем нарастания порядка микросекунд. Излучатель с малой теплоемкостью был изготовлен из сапфировой подложки толщиной 0,34 мм с нанесенной на нее нихромовой пленкой. 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 пример измеренного отклика по напряжению болометра с логопериодической антенной на импульс длительностью 10 мкс с амплитудой 26 В, что соответствует переданной излучателю энергии 7,3 мкДж. Измеренная в этих экспериментах собственная постоянная времени реакции болометра на внешнее излучение, полученная с учетом скорости нагрева излучателя и задержек, вносимых емкостью измерительной линии и временем срабатывания предусилителя, составила 1,8 ± 0,5 мкс при электронной температуре приемника 0,17 К. Исходя из этого результата и известной теплоемкости нормального металла болометра, равной при этой температуре $4{,}5\cdot10^{-18}$ Дж/К, можно получить оценку коэффициента теплопроводности между электронной и фононной системами в нормальном металле. Он составляет 2,5 пВт/К, что согласуется с известными значениями электрон-фононного взаимодействия для меди [3]. Также полученная постоянная времени болометра позволяет оценить чувствительность приема на уровне 10^{-17}–10^{-18} Вт/Гц$^{1/2}$.

Подобные измерения также проводились для приемников, представляющих из себя матрицы из ста параллельно подключенных болометров с кольцевыми антеннами и для метаматериалов с болометрами в кольцевых антеннах меньшего диаметра. Полученные для них значения постоянной времени превышают результат для одиночного приемника и составляют от нескольких микросекунд для матриц колец до десятка микросекунд для метаструктур. Это говорит о необходимости продолжить дальнейшее изучение процессов отклика матриц СИНИС болометров на высокочастотное излучение, что является важным в том числе и для понимания практических возможностей их использования.

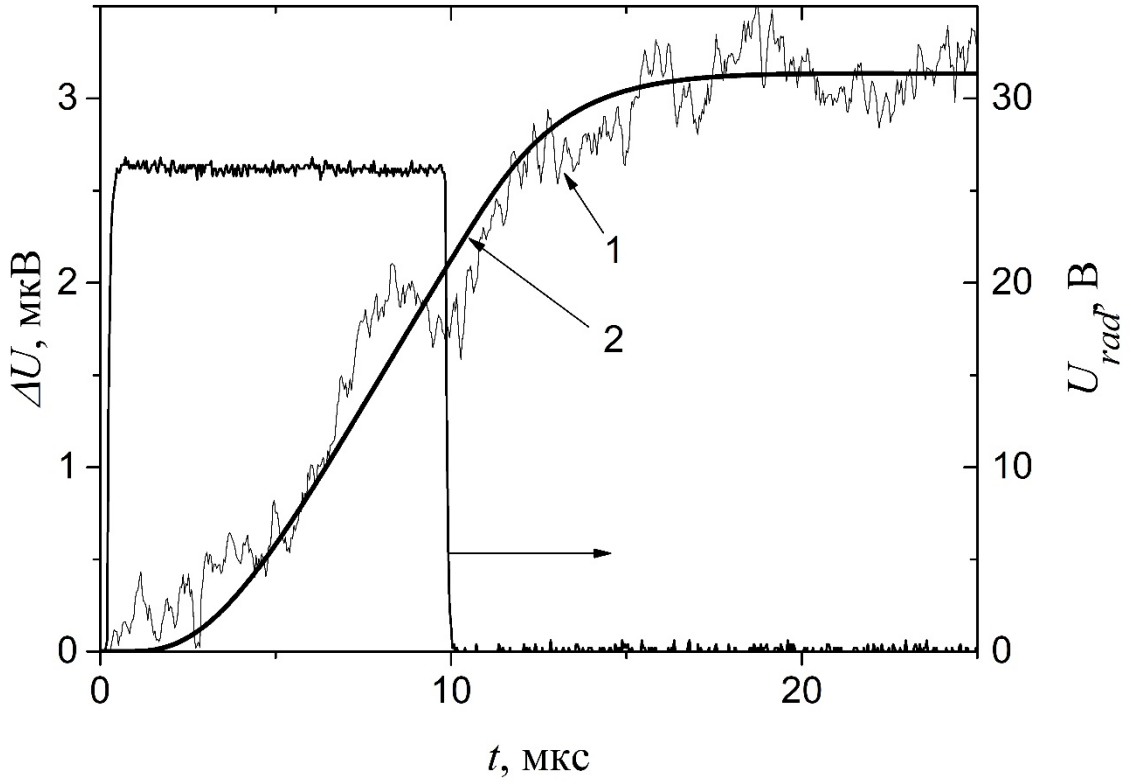


Рис.1. Пример отклика болометра (кривая 1) на излучение источника, нагреваемого импульсом длительностью 10 мкс и амплитудой 26 В (кривая без подписи). Кривая 2 — расчет отклика с учетом собственной постоянной времени болометра 1,8 мкс. Ток смещения 3 нА, дифференциальное сопротивление болометра 14 кОм. Температура подложки 100 мК.

Литература

1. *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. *Lemzyakov S.A., Tarasov M.A., Edelman V.S.* Investigation of the Speed of a SINIS Bolometer at a Frequency of 350 GHz // JETP. 2018. V. 153 (6), P. 992.
3. *Courtois, H., Hekking, F.W., Nguyen, H.Q., Winkelmann C.B.* Electronic coolers based on superconducting tunnel junctions: fundamentals and applications // J. Low Temp. Phys. 2014. V. 175. P. 799.

УДК 53.07

Тонкопленочный низкотемпературный эмиттер электронов

С.И. Халдеев, В.В. Завьялов

Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Существует множество различных способов получения свободных электронов в вакууме или в конденсированной среде. Конкретно, для низкотемпературных измерений и исследований, используются, как правило, лишь некоторые из них, и каждый из этих способов обладает теми или иными существенными недостатками. Автоэлектронный эмиттер и тлеющий разряд требуют для своей работы приложения потенциала в несколько сотен вольт и рождают высокоэнергетичные электроны с энергией, много выше потенциала ионизации атомов гелия. Термоэлектронный эмиттер создает сильные тепловые потоки, фотоэлектронный эмиттер нуждается в подводе

коротковолнового УФ-излучения внутрь экспериментальной криокамеры, а радиоактивный источник рождает электроны с энергией в несколько кэВ.

В этой связи описанный в работе [1] тонкопленочный низкотемпературный эмиттер является решением многих из перечисленных проблем. Данный эмиттер представляет собой структуру металл–изолятор–металл (рис. 1), в которой металлы выполняют роль электродов. Металлы разделены между собой тонким слоем диэлектрика. Подобный барьерный слой допускает протекание небольшого «туннельного» тока между электродами. В качестве верхнего электрода, как правило, используется тонкое золото, толщиной порядка 100 Å. Благодаря небольшой толщине барьерного слоя и рабочего металла, электрон имеет шанс достигнуть поверхности эмиттера не диссипировав полностью приобретенную энергию и, если его энергия превысит работу выхода металла верхнего электрода, покинуть его по аналогии с «горячим» электроном при внешнем фотоэффекте. При этом энергия вылетевших электронов не может превышать разности потенциалов на структуре (рабочее напряжение < 15 В), а их энергетический разброс составляет не более нескольких эВ.

При помощи прибора, изготовленного нами по описанной схеме, нам удавалось получить токи эмиссии свыше 1 нА при рабочем напряжении, равном 10 В, при этом выделяемая на образце мощность не превышала 10^{-5} Вт. Данный результат демонстрирует исключительную пригодность данного прибора для низкотемпературных экспериментов.

Кроме того, тонкопленочный эмиттер, являясь сложной структурой, работа которого основана сразу на нескольких физических явлениях, представляет собой не только средство получения свободных электронов для различных экспериментов, но и сам может являться целью исследования или использоваться для изучения различных свойств и характеристик материалов. В частности, при помощи данного прибора группой японских ученых [2] были изучены и вычислены длины свободного пробега для «горячих» электронов относительно электрон-электронных рассеяний для ряда металлов.

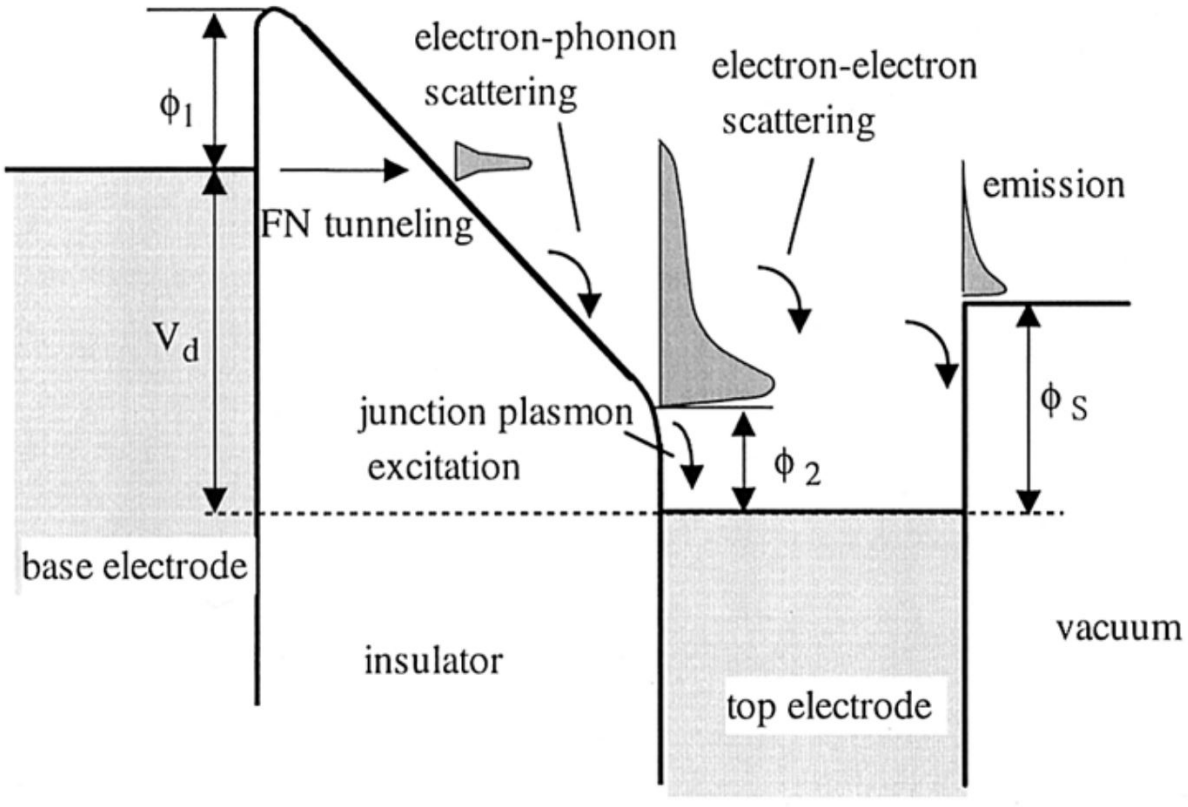


Рис. 1. Зонная диаграмма для тонкопленочного эмиттера, с указанием основных механизмов рассеяния и распределений электронов по энергиям на каждом этапе пролета [2]

Литература

1. *Onn D. G., Smejtek P., and Silver M.* Cryogenic thin-film electron emitters // Journal of Applied Physics. January 1974. 45:119–125.

2. *Kusunoki T. and Suzuki M.* Increasing emission current from MIM cathodes by using an Ir-Pt-Au multilayer top electrode // IEEE Transactions on Electron Devices. Aug 2000. 47(8):1667–1672.

УДК 538.955

Энергетическая щель в квазиодномерном S = 1/2 антиферромагнетике с однородным взаимодействием Дзялошинского–Мории $K_2CuSO_4Cl_2$

Т.А. Солдатов[1,2]***, А.И. Смирнов***[2]

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

Кристалл со спином магнитного иона «половина» $K_2CuSO_4Cl_2$ представляет собой редкий пример спин-цепочечной структуры с антиферромагнитным обменом и однородным взаимодействием Дзялошинского-Мории (ДМ) [1]. В нем температура Кюри–Вейсса T_{CW} = 3 K, однако, упорядочение не возникает вплоть до очень низкой температуры T_N = 77 mK. Поэтому в области температур $T_N < T << T_{CW}$ спиновая система сильно коррелирована и находится в состоянии, близком к спин-жидкостному состоянию невзаимодействующих спиновых цепочек, для которых элементарными возбуждениями являются так называемые *спиноны*, в отличие от обычных магнонов несущие спин 1/2. Как предсказывает теория [2], однородное взаимодействие ДМ между соседними спинами 1/2 в гейзенберговской цепочке модифицирует двухспинонный континуум возбуждений, сдвигая весь спектр в **q**-пространстве на волновой вектор $q_{DM} = D/(Ja)$, где **D** – векторный параметр ДМ, параллельный оси *b* согласно симметрийному анализу, *a* – период спиновой цепочки. В результате в магнитном поле **H** || **D** линия электронного спинового резонанса (ЭСР) расщепляется на две. Расщепление равно ширине несмещенного континуума на волновом векторе q_{DM}. Таким образом возникает спинонный дублет ЭСР. При ориентации **H** перпендикулярно **D** линия ЭСР не расщепляется, но сдвигается в область слабых полей, указывая на открывание энергетической щели в нулевом поле. Формирование спинонного дублета при понижении температуры ниже T_{CW} было ранее обнаружено в изоструктурном соединении $K_2CuSO_4Br_2$ [3] и в квазидвумерном S = 1/2 антиферромагнетике на треугольной решетке Cs_2CuCl_4 [4].

В данной работе мы изучаем эволюцию спектра магнитного резонанса при охлаждении ниже T_{CW} в $K_2CuSO_4Cl_2$ в условиях, когда однородное взаимодействие ДМ конкурирует с более сильным межцепочечным обменом в формировании низкочастотной спиновой динамики. Наши измерения, выполненные в диапазоне температур 0.45 K < T < 80 K и частот 0.5 ГГц < ν < 80 ГГц, показывают, что для всех ориентаций магнитного поля наблюдается одиночный магнитный резонанс на частоте, отличающейся от ларморовской при низких температурах. Мы обнаруживаем энергетическую щель 2 ГГц. Этот одиночный резонанс мы связываем с низкочастотной компонентой дублета. Высокочастотная компонента не наблюдается ввиду сильного уширения или малой интенсивности. Анализ показал, что спинонный дублет существенно подавлен именно по причине влияния межцепочечного обмена. Таким образом, полученный спектр соответствует кроссоверу между спинонным дублетом и ларморовской модой, характерной для гейзенберговских спиновых систем.

Литература

1. *Hälg M., Lorenz W.E.A., Povarov K.Yu., Månsson M., Skourski Y., Zheludev A.* Quantum spin chains with frustration due to Dzyaloshinskii-Moriya interactions // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 174413.
2. *Gangadharaiah S., Sun J., Starykh O.A.* Spin-orbital effects in magnetized quantum wires and spin chains // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 054436.
3. *Smirnov A.I., Soldatov T.A., Povarov K.Yu., Hälg M., Lorenz W.E.A., Zheludev A.* Electron spin resonance in a model S = 1/2 chain antiferromagnet with a uniform Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. P. 134417.
4. *Povarov K.Yu., Smirnov A.I., Starykh O.A., Petrov S.V., Shapiro A.Ya.* Modes of magnetic resonance in the spin liquid phase of Cs_2CuCl_4 // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 037204.

Critical Temperature in Aluminum Films

I.A.Golokolenov[1,2,*]***, E.A.Sedov***[2]***, V.V Zavyalov***[1,2]

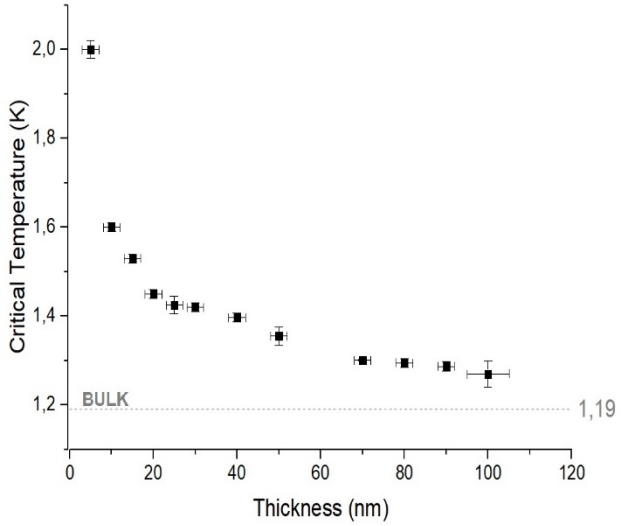
[1]Kapitza Institute for Physical Problems
[2]Higher School of Economics

Even back in 1938 an increase of the superconducting critical temperature with a reduction of an Al film thickness was observed, while some other superconductors exhibit an opposite dependence [1, 2]. Despite the long history of studying, the nature of this size-effect is still disputable. Presumably, origin of that effect is attributed to amorphous phase, impurities or other essential inhomogeneities in crystal structure of the samples [3]. Anyway, it has been investigated mainly with highly disordered films, but virtually unexplored for ultrathin monocrystalline structures. Besides, there was no strict control of purity and structure of samples.

There is hypothesis that if you take pure monocrystal film of any thickness there will not be difference of superconductive critical temperature from the bulk. However, it is still not confirmed neither as disproved because of complexity of fabrication and quality control. Our colleges from Greece manufactured samples of different thickness (from 10 to 100nm), using molecular beam epitaxy method. We control their structure with atomic -force and scanning electron Microscopy(AFM, SEM) and angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES).

We have performed investigation of thickness dependence of critical temperature in atomic pure monocrystal aluminum films. All measurements were set in He-3 based cryo-insert, which is capable to obtain temperature down to 300 mK. To improve accuracy of temperature measurements our thermometers were additionally calibrated by reference point of superconducting transition in bulk aluminum samples. To avoid influence of noises setup was equipped with EMS- filters.

At the picture you can see current results for samples, which were fabricated using high-vacuum e-beam evaporation method. Investigation of ones, made with molecular beam epitaxy, is still in progress.



This project is supported by The Ministry of Education and Science of the Russian Federation, joint Russian-Greek project «RFMEF161717X0001» and «#T4ΔPΩ -00031» «Experimental and theoretical studies of physical properties of low-dimensional quantum nanoelectronic systems».

References

1. *Shalnikov A.* Superconducting thin films // Nature. 1938. V. 142. P. 74.
2. *Shanenko A.A.* [*et al.*] // Physical Review B. 2006. 74. 052502.
3. *Maciej Zgirski* [*et al.*] // NanoLetters. 2005. V. 5. N 6. 1029–1033.

СЕКЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ И ЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Председатель: Ю.Ю. Клосс (д.ф.-м.н., доцент)

Зам. председателя: В.Г. Мадеев (д.т.н., профессор)

Секретарь: М.А. Ваганова

Дата: 22.11.2018

Время: 12:30-15:30

Место: Долгопрудный, Первомайская ул., д. 3, ауд. 502А КПМ, МФТИ

УДК 533.72

Проблемно-моделирующая среда для анализа газокинетических процессов в полости межэлектродного зазора термоэмиссионного электрогенерирующего канала ЯЭУ

Д.В. Щербаков[1,2]***, Д.Ю. Любимов***[1,3]***, А.С. Самонов***[2,4]***, С.Э. Саркисов***[2]***, О.К. Шайхатаров***[2,4]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3]НПО «Луч»
[4]ООО «ЛОКиП»

Актуальной задачей моделирования газокинетических сред является оценка макропараметров газообразных продуктов деления в полости межэлектродного зазора термоэмиссионного электрогенерирующего канала ЯЭУ (ядерной энергетической установки). Эти установки получили наибольшее развитие из-за компактных конструкционных особенностей [1]. Для отработки и обоснования конструкции ЭГК проводятся его испытания в петлевом канале ядерного реактора (рис. 1) [2]. В связи с развитием мощностей вычислительной техники стало возможно применение численного метода решения уравнения Больцмана к задачам моделирования газокинетических процессов:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{p_x}{m}\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{p_y}{m}\frac{\partial f}{\partial y}=\int\left(f f_1'-f f_1\right)gbdbd\varepsilon d\mathbf{p}_1 .$$

Межэлектродный зазор представляет собой полость между цилиндрами, длина которой 500 мм, а ширина – 0,4 мм. Полость заполнена рабочим телом – цезием под давлением 150 Па, согласно оценочным расчетам давление Xe, Kr в полости МЭЗ составляет 10^{-3}–10^{-4} Па [3], для смеси характерны числа Кнудсена в диапазоне 0,2–100 ед.

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 проведения расчетов была реализована программа на языке C++, для использования программы необходимы библиотеки boost и openmpi. В программе используются алгоритмы: генерации пространственной сетки для TVD-схемы, расщепления на физические процессы, разбиения и объединения пространственной сетки по параллельным процессам (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.

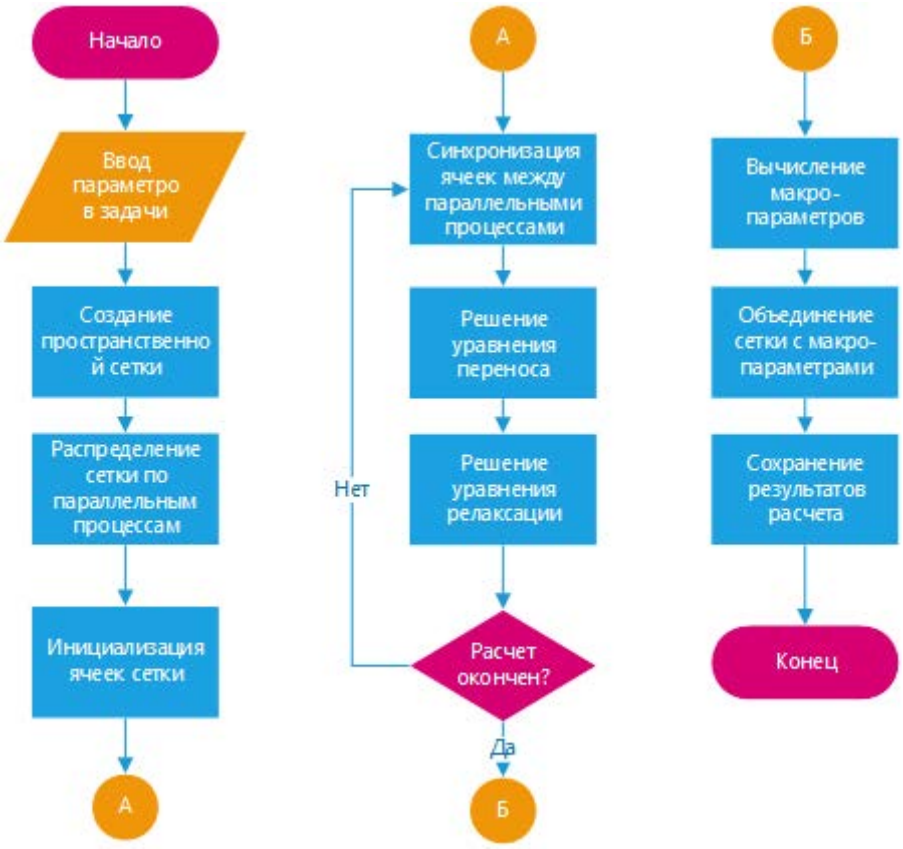


Рис. 1. Блок-схема программы

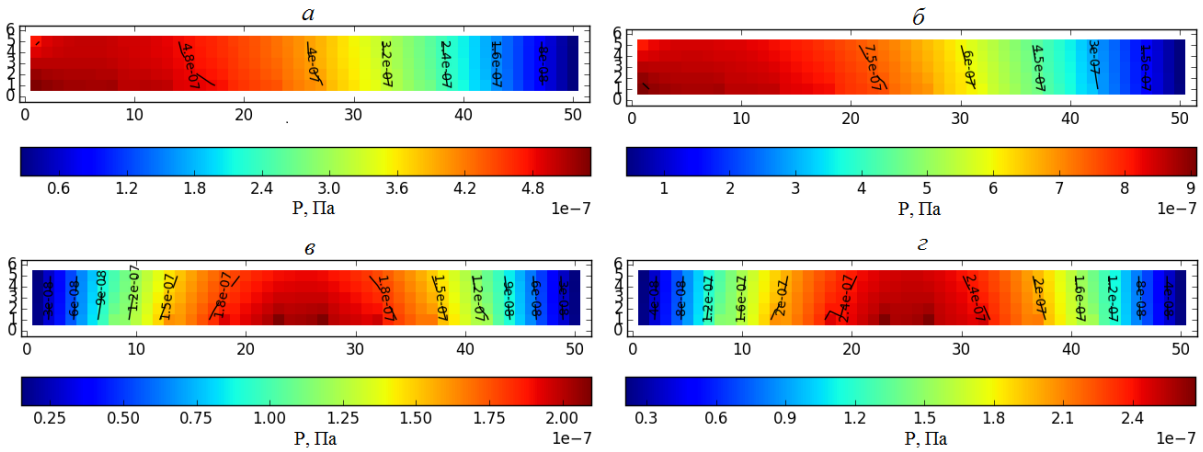


Рис. 2. Давление в схеме А: *а* – Kr; *б* – Xe; в схеме Б: в – Kr; г – Xe

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (17-08-00339, 18-08-00495, 18-08-00697, 17-08-00963).

Литература

1. *Алексеев С.В., Выбыванец В.И., Гонтарь А.С.* [*и др.*] Перспективные топливные материалы для термоэмиссионных ЯЭУ // Атомная энергия. декабрь 2013. Т. 115. № 6. С.322–331.
2. *Синявский В.В.* Методы и средства экспериментальных исследований и реакторных испытаний термоэмиссионных электрогенерирующих сборок. М.: Энергоатомиздат. 2000. 375 С.
3. *Любимов Д.Ю., Федик И.И., Шумилов А.А.* Влияние продуктов деления на выходную мощность термоэмиссионных ЭГК с сообщающимися и разделенными полостями твэла и межэлектродного зазора // Атомная энергия. 2011. Т. 110. № 6. С.321–327.
4. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.

УДК 519.644.7

Генерирование сеток Коробова и точность вычисления интегралов для анализа газокинетических процессов

***М.А. Ваганова*[1,2], *Е.А. Станчин*[1,2], *В.В. Рябченков*[2,3], *Т.А. Сазыкина*[2,3], *Г.С. Колядко*[3]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3] ООО «ЛОКиП»

Разработка методов компьютерного моделирования неравновесных газокинетических процессов на основе уравнения Больцмана требует эффективных методов и алгоритмов для вычисления интеграла столкновений. Одним их таких подходов являются сетки Коробова.

Сеткой Коробова называется сетка в n-мерном единичном кубе с узлами $M_k = \left(\left\{ \frac{a_1 k}{p} \right\} \ldots \left\{ \frac{a_n k}{p} \right\} \right)$, где $k \in \overline{1, p}$, коэффициенты $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{Z}$ определяются по данному простому числу p (мощности сетки) и размерности пространства n, фигурными скобками обозначена дробная часть числа. Получаемые узлы распределены по кубу равномерно (рис. 1). Интеграл $\int_0^1 \ldots \int_0^1 f(\vec{x}) dx_1 \ldots dx_n$ вычисляется как $\frac{1}{p} \sum_{k=1}^{p} f(M_k)$ по построенной сетке. Такие сетки были использованы, в частности, для вычисления интеграла столкновений в работе [1].

Метод вычисления коэффициентов дает следующая теорема.

Теорема 1. *Пусть для целых* z *функция* $H(z)$ *определена равенством*

$$H(z) = \frac{3^n}{p} \sum_{k=1}^{p} \left(1 - 2 \left\{ \frac{k}{p} \right\} \right)^2 \ldots \left(1 - 2 \left\{ \frac{k z^{n-1}}{p} \right\} \right)^2, \qquad (1)$$

где p *– простое число, большее* n. *Если при* $z = a$ *достигается минимум функции* $H(z)$ *на интервале* $1 \le z \le p-1$, *то целые* $a_1 = 1, a_2 = a, \ldots, a_n = a^{n-1}$ *будут оптимальными коэффициентами по модулю* p [2].

Были построены восьмимерные сетки для значений p из диапазона $10^4 \div 10^7$. По ним вычислялись интегралы от функций:

$$f_1(\vec{x}) = \begin{cases} 1, x \in Q = [0.35, 0.65] \times \ldots \times [0.35, 0.65] \\ 0, x \in [0,1] \times \ldots \times [0,1] \setminus Q \end{cases},$$

$$f_2(\vec{x}) = \exp\left(-25 \left((x_1 - 0.50)^2 + \ldots + (x_8 - 0.57)^2 \right) \right),$$

$$f_3(\vec{x}) = \exp\left(-10 \left((x_1 - 0.50)^2 + \ldots + (x_8 - 0.57)^2 \right) \right).$$

Для исследования точности метода интеграл считался многократно на периодически сдвинутой на случайный вектор сетке, определялось среднее значение I, среднеквадратичное отклонение σ и относительная погрешность $\varepsilon = \sigma / I$. Те же интегралы были вычислены с помощью системы из восьми наложенных сеток Коробова, сдвинутых друг относительно друга на случайный вектор, а также с помощью метода Монте-Карло. Полученные при использовании каждого из методов зависимости относительной погрешности ε от мощности сетки p приведены на рис. 2. Графики построены в двойном логарифмическом масштабе, и линеаризованы с помощью МНК. Как видно из графиков, точность метода сеток Коробова зависит от интегрируемой функции, тогда как ошибка метода Монте-Карло спадает всегда как $1/\sqrt{p}$. Для всех рассмотренных функций при использовании сеток Коробова ошибка спадает быстрее. В исследованном диапазоне мощностей погрешность вычисления по одной сетке меньше, чем по системе из восьми наложенных сеток, но их отличие не существенно.

Кроме того, были построены комбинированные сетки путем случайного сдвига, зеркального отражения и вращения координат и сетки. Далее для линейной по всем координатам функции $f(x_1,\ldots,x_8) = \prod_{i=1}^{8}(b_i x_i + c_i)$ был вычислен интеграл по квадрату $[0,1]\times\ldots\times[0,1]$ по сдвинутой сетке Коробова и по сдвинутой + отраженной сеткам. В результате интеграл по первой сетке был получен с точностью порядка 10^{-5}, а по второй – абсолютно точно.

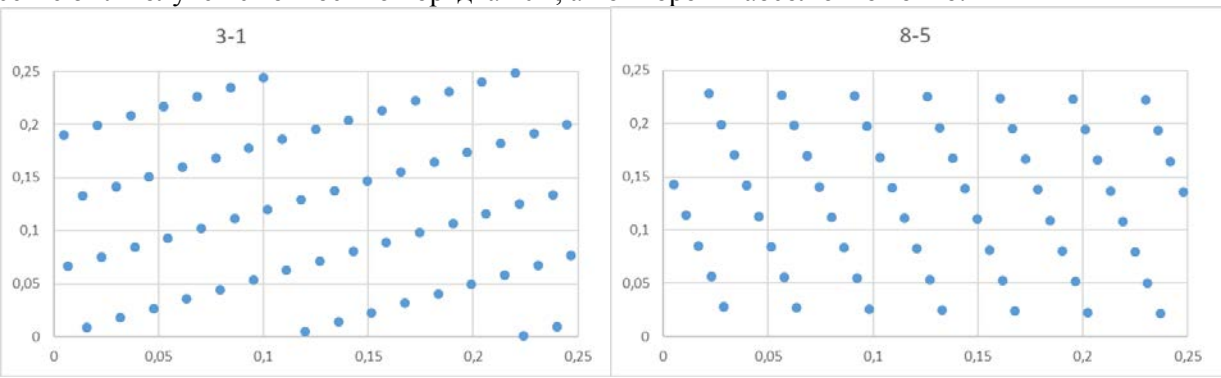


Рис. 1. Прокция расположения узлов 8-мерных секток Коробова на 3–1 и 8–5 координаты (*y*–*x*)

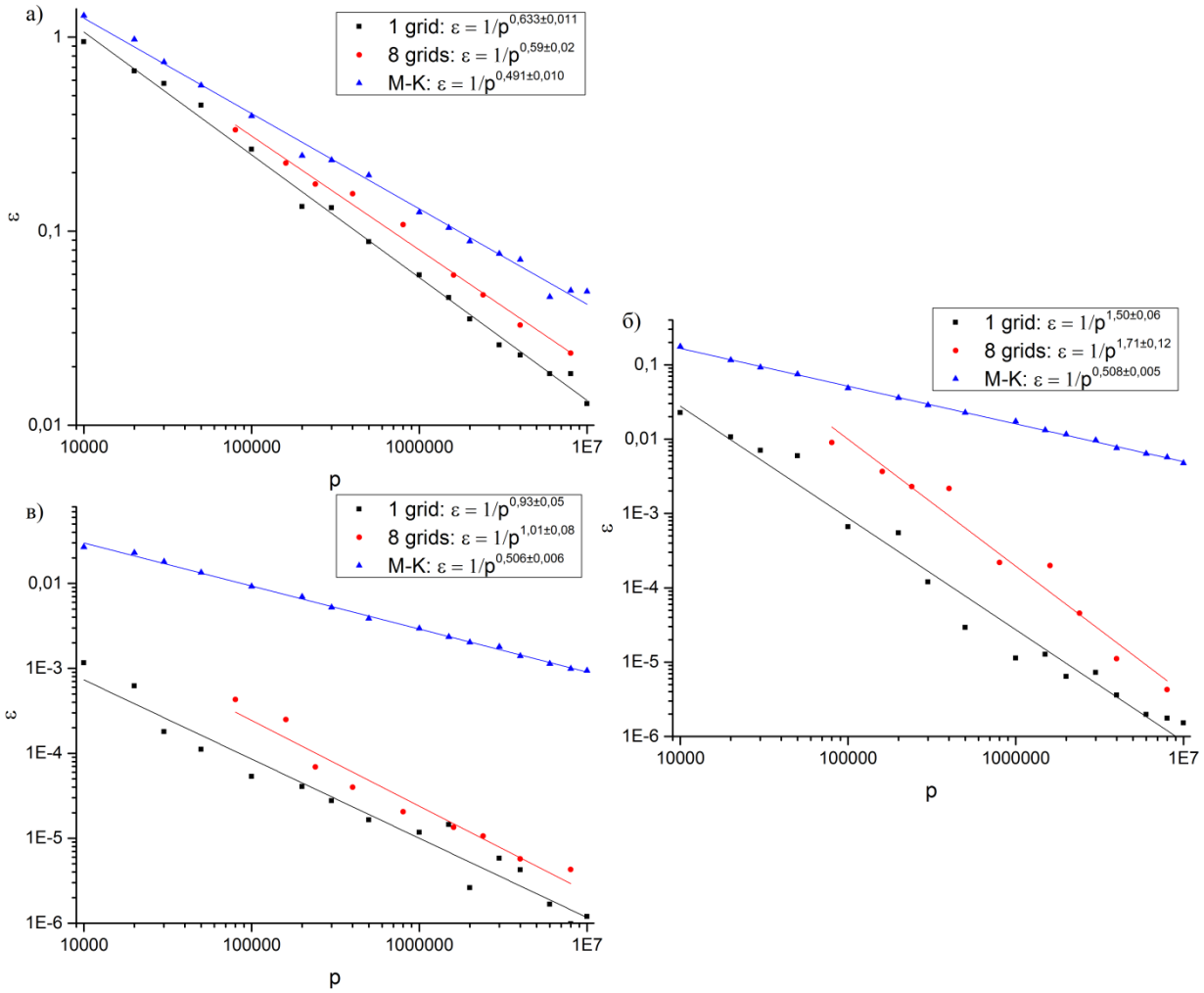


Рис. 2. Зависимость относительной погрешности от мощности сетки для интеграла от а) f_1, б) f_2, в) f_3.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-08-00523, 18-08-00291, 17-07-00700).

Литература

1. *Черемисин Ф.Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
2. *Коробов Н.М.* Тригонометрические суммы и их приложения. М.: Наука, 1989. 240 с.

УДК 519.876.5

Компьютерное моделирование течения разреженного газа по тонкой трубке на основе кинетической теории

***М.Ю. Ширкин*[1], *Н.А. Зименков*[2], *А.А. Захаров*[2], *Е.П. Дербакова*[1], *И.Е. Квасов*[2], *А.В Басалаев*[2]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] ООО «ЛОКиП»

В кинетической теории газ обычно описывается функцией распределения $f(\vec{x},\vec{v},t)$. Количество частиц, импульс и координата которых лежат в области фазового пространства Г можно вычислить как $N_\Gamma = \int_\Gamma f(\vec{x},\vec{v},t)dx^3dv^3$.

В случае смеси n газов эволюция функций распределения описывается системой из n уравнений Больцмана:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot (\vec{\nabla} f_i) = I_i(f_1, f_2, ..., f_n), \quad i = 1, 2, ..., n.$$

Предлагается решить следующую задачу. Имеется два сосуда, соединенных тонкой трубкой с клапанами, позволяющими контролировать поток газов через трубку. Один из сосудов изначально пуст, во втором находится смесь газов с различными молекулярными массами, клапаны закрыты. В некоторый момент времени клапаны открываются, и газы начинают заполнять другой сосуд. Требуется выполнить компьютерное моделирование процесса истечения газов из одного сосуда в другой.

Если $f_1(\vec{x}, \vec{v}, t), f_2(\vec{x}, \vec{v}, t)$ – функции распределения газов, то уравнения будут иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot (\vec{\nabla} f_1) = I_1(f_1, f_2), \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial t} + \vec{v}_2 \cdot (\vec{\nabla} f_2) = I_2(f_1, f_2), \end{cases}$$

$I(f_1, f_2)$ – интеграл столкновений. В рассматриваемой задаче основной предмет расчета – течение газов в трубке, и, хотя длина свободного пробега сравнима с ее поперечными размерами, полагается $I_1(f_1, f_2) = I_2(f_1, f_2) = 0$ – отсутствие столкновений. В таком случае система распадается на два независимых уравнения, которые можно решать отдельно друг от друга, таким образом, задача существенно упрощается.

В начальный момент времени газы находятся в термодинамическом равновесии при температуре T: $f(\vec{x}, \vec{v}, 0) = A \exp\left(-\dfrac{mv^2}{kT}\right)$. Численное решение уравнения происходит на прямоугольной сетке. Для каждого значения скорости $\vec{v}$ решается дискретная аппроксимация уравнения переноса. Введем следующие индексные обозначения:

$$f^n_{i,j,k}(\vec{v}) = f(ih, jh, kh, \vec{v}, nt).$$

Уравнение переноса аппроксимируется явной схемой первого порядка Лакса, что позволяет вычислить концентрацию на $n + 1$ шаге, зная значения на шаге n:

$$f^{n+1}_{i,j,k} = f^n_{i,j,k} + \gamma_x (f^n_{i,j,k} - f^n_{i+s_x,j,k}) + \gamma_y (f^n_{i,j,k} - f^n_{i,j+s_y,k}) + \gamma_z (f^n_{i,j,k} - f^n_{i,j,k+s_z}); \quad \gamma_i = \frac{\tau |v_i|}{h}; \quad s_i = \operatorname{sign}(v_i).$$

Далее приведены результаты работы программы для смеси двух газов. Массы газов $m_1 = m/4,\ m_2 = m$. Одной из полезных величин является отношение их количеств $k = N_2 / N_1$.

Как можно видеть, для первого сосуда максимальное разделение достигается на $t \approx 8000\ \tau$, и достигает $k \approx 1.2$.

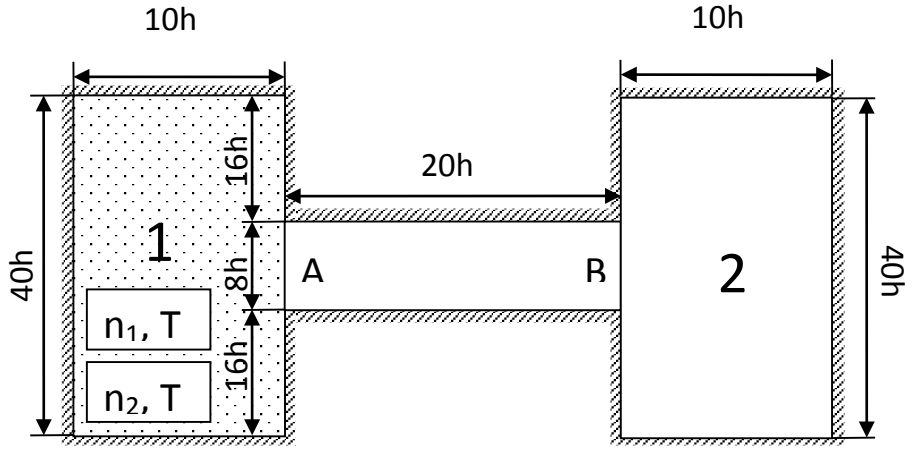


Рис. 1. Схема установки (пропорции не соблюдены)

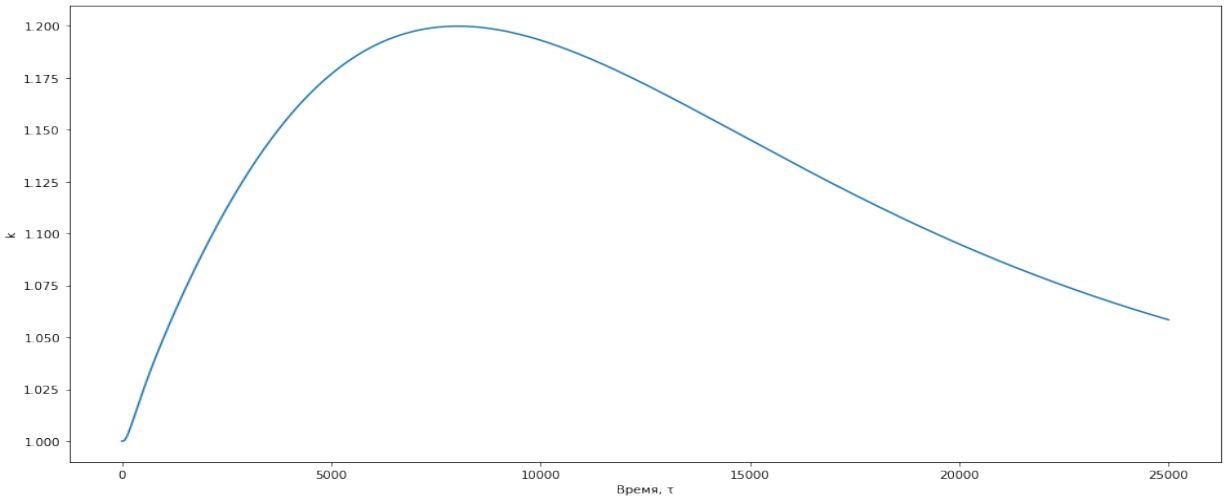


Рис. 2. График зависимости отношения количеств газов k от времени на интервале (0, 25000τ) для первого сосуда и трубки

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (17-07-00263, 17-08-00252, 16-08-00072, 18-08-00438, 17-08-00606).

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Том 10. Физическая кинетика. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2002. 536с.
2. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа (кинетическая теория). – М.: Наука, 1967. 440 с.
3. *Петров И. Б., Лобанов А. И.* Лекции по вычислительной математике.
4. *Черемисин Ф. Г.* Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана – М.: МФТИ, 2015. 80 с.
5. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. – М.: Иностранная литература, 1960.

УДК 519.876.5

Анализ и компьютерное моделирование движения аэрозоля в верхних слоях атмосферы

***С.С. Ситников*[1,3], *Ф.Г. Черемисин*[1,2], *Ю.Ю. Клосс*[1,2], *П.В. Шувалов*[4], *А.В. Морозов*[3,4]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[4]ООО «ЛОКиП»

Движение аэрозоля в верхних слоях атмосферы определяется не только притяжением к земной поверхности, но и взаимодействием с молекулами атмосферы. Данный эффект проявляется при наличии градиента температуры в разряженном газе, в результате чего на тело, помещённое в газ, начинает действовать дополнительная сила, направленная по градиенту температуры.

Целью данной работы явилось изучение описанного явления, качественная и количественная оценка его влияния на движение тел в верхних слоях атмосферы. Все расчёты, численные и аналитические, производились для простейшей геометрии куба, помещённого в газ с заданным градиентом температуры. Была получена аналитическая оценка значения силы, действующей на тело в такой конфигурации. Для численного моделирования решалось кинетическое уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = I,$$

где $f(t,\vec{r},\vec{\xi})$ – функция распределения, зависящая от семи переменных, I – интеграл столкновений. Ищется установившееся решение при $t \to \infty$. Решаемая система получается при дискретизации функции распределения на скоростной сетке $\vec{\xi}_\gamma$. При счете используется сфера в пространстве скоростей радиусом в четыре характерные тепловые скорости. Решение производилось на кубической сетке с использованием метода расщепления кинетического уравнения на уравнения адвекции и релаксации [1,2].

В работе получены количественные оценки степени влияния разряженной атмосферы на движение в ней аэрозоля для чисел Кнудсена порядка и больше одного. Данная работа может иметь приложение в исследованиях стратосферы, моделировании движения различных аэрозолей в верхних слоях атмосферы, при проектировании высотных летательных аппаратов, где нагрев поверхности тела может создать дополнительные аэродинамические реакции, включая подъемную силу, а также в областях, связанных с микроэлектроникой. Рассмотренный эффект также может использоваться при производстве микроустройств, где требуется создать чистую от пылинок среду. Основываясь на полученных оценках, улавливание аэрозоля в этом случае можно производить, создавая подходящие температурные поля.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-07-00712, 18-07-00323, 16-08-00184).

Литература

1. *Черемисин Ф.Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
2. *Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Рябченков В.В., Черемисин Ф.Г.* Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011.

УДК 519.876.5

Моделирование ударных волн в микроканалах на основе теории Больцмана

***Д.В. Замиусская*[1], *А.А. Бабайлов*[3], *И.В. Говорун*[2,3], *В.Г. Жотиков*[1], *З.П. Осипова*[2,3], *Е.Л. Остапов*[2]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3] ООО «Техноим»

В данной работе изучаются и моделируются процессы формирования и распространения ударных волн в микроканалах на основе газокинетической теории Больцмана. 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 применимости уравнений сплошной среды для таких ситуаций соответствует значению числа Кнудсена 0.01, превышение этого значения делает необходимым использование 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 значительно 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 перегородки.

Распад начального разрыва давления при резком удалении перегородки создает ударную волну, которая движется внутри измерительной секции. В работе рассматривается двумерное

плоское течение, что соответствует течению в щели, и три типа граничных условий: диффузные, зеркальные и диффузно-зеркальные.

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

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

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 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

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

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. 3. Схематическое изображение ударной трубы

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (16-08-00308, 17-08-00443, 17-08-00152, 17-08-00213, 18-08-00132).

Литература

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

УДК 533.5

Исследование свободномолекулярного течения газов в узких каналах.

***А.Н. Оразбаев*[1], *А.В. Сакмаров*[2,3], *Д.О. Михайлов*[2], *М.Ю. Сметанин*[3], *М.Б. Федорова*[3], *И.В. Говорун*[3], *М.В. Калинин*[3]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3] АНО «ЦПКТ»

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 г.[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 не естественным. Использование общепринятого зеркально-диффузного отражения требует проведения численного моделирования.

В данной работе было смоделировано разреженное течение газа через узкие каналы, методом многопоточного программирования.

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 ($T_1 = 2T_2$) и концентрациях n_1 и n_2 ($n_2 = 2n_1$). 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.

$$f(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = n_j \left(\frac{m}{2\pi k T_j} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(\xi_x^{\,2} + \xi_y^{\,2} + \xi_z^{\,2})}{2kT_j} \right), \qquad (1.15)$$

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 $(1-\alpha)$ молекул отражается зеркально. Температура диффузно отраженных молекул равна температуре стенки. От плоскостей симметрии молекулы отражаются зеркально.

Расчеты производились на основе численных методов первого и второго порядков точности. Несмотря не 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 2 GB и 8 GB 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, $\alpha = 0$).

В данной работе было успешно смоделировано течение свободномолекулярного газа через узкие каналы. Разработан программный код, позволяющий многопоточно проводить расчеты

нашей задачи. Мы видим, что, как и предсказывалось, условия, справедливые для классической газодинамики, здесь не выполняются. Также в установившемся режиме наблюдаются очень интересные вихри в центре каждого из сосудов.

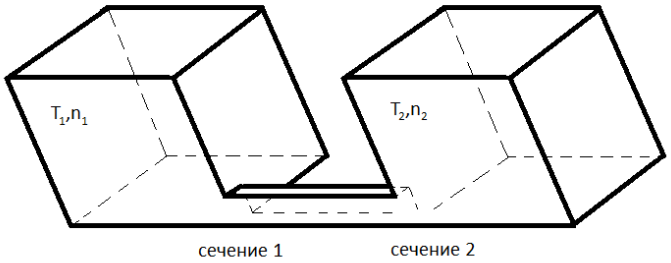


Рис. 4. Схема задачи

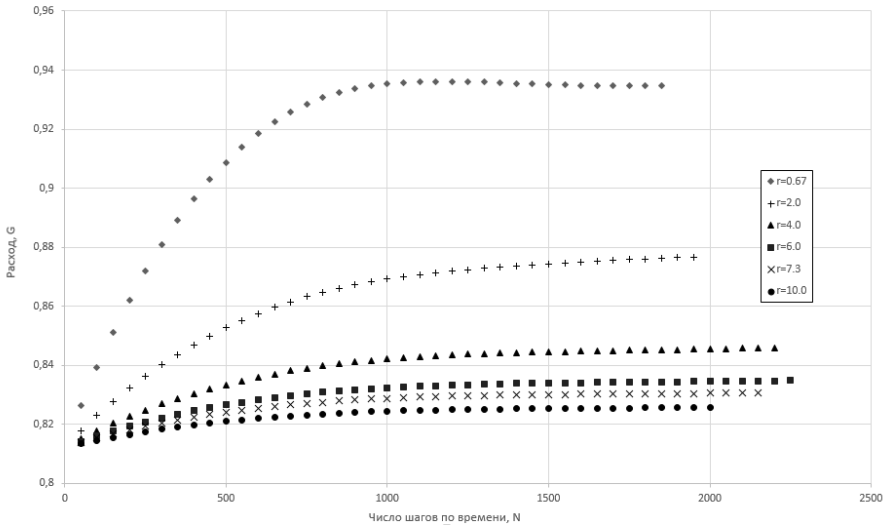


Рис. 2. Зависимость расхода от числа шагов по времени для разных значений *r*

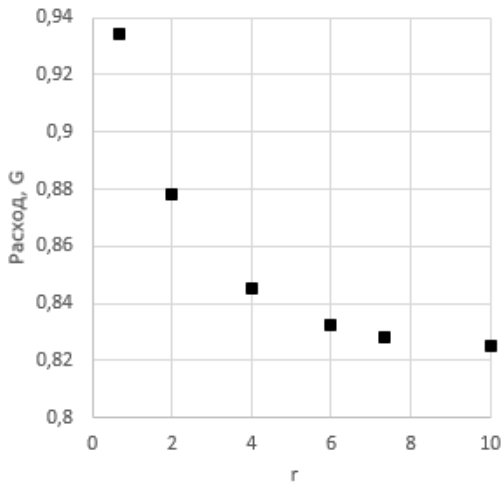


Рис. 3. Зависимость расхода в установившемся режиме от *r* при α = 1

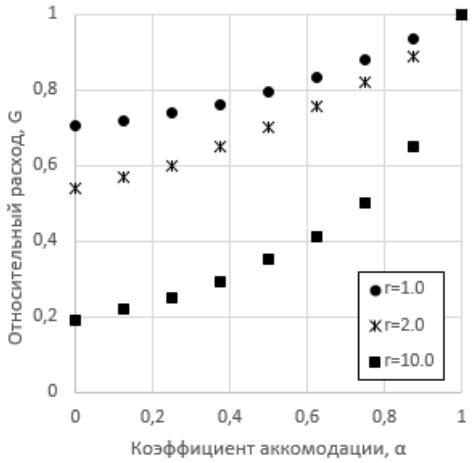


Рис. 4. Зависимость установившегося расхода от коэффициента аккомодации для разных значений *r*

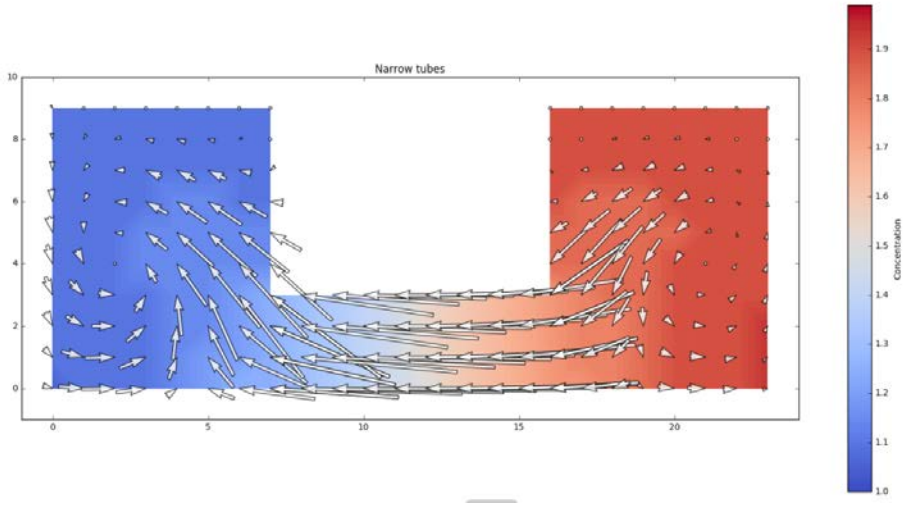


Рис. 5. Векторное поле скоростей и поле концентрации для трехмерного случая. (python-matplotlib)

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ (18-08-00192, 17-08-00680, 17-08-00443, 16-08-00184, 18-07-00376, 18-07-00410).

Литература

1. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
2. *Knudsen M.* // Ann. Physik. 1910. 31(4). 205.

СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Председатель: Г.Э. Норман (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: Н.М. Щелкачев (к.ф.-м.н., доцент)

Секретарь: И.Д. Федоров

Дата: 23.11.2018

Время: 10:00-13:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, Читальный зал ГК (синяя секция), МФТИ

УДК 538.931

Диффузия в леннард-джонсоновской системе

Ю.А. Поляченко[1,2]***, А.В. Тимофеев***[1,2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Объединённый институт высоких температур РАН

Рассмотрен процесс самодиффузии в леннард-джонсоновском газе. Моделирование эволюции системы проводилось путем численного решения системы уравнений Ньютона с заданными начальными условиями для системы частиц, взаимодействующих попарно. Все формулы приведены в леннард-джонсоновских единицах ε, σ, m [1]:

$$\ddot{\vec{r}}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}\left(\vec{r}_{1\ldots N}\right), \tag{1}$$

$$\vec{F} = -\frac{\partial \varphi}{\partial r}\frac{\vec{r}}{r}, \tag{2}$$

$$\varphi(r) = 4\left(r^{-12} - r^{-6}\right), \tag{3}$$

где $\vec{r}_i$ – радиус-вектор i-й частицы, $\vec{F}_{ij}$ – сила взаимодействия i-й j-й частиц, φ – потенциальная энергия взаимодействия пары частиц.

Задача решалась при периодических граничных условиях [2]. Система дифференциальных уравнений решалась численно, методом второго порядка точности Leap-Frog [3]. Моделирование и обработка результатов проводилась с помощью самописных кодов. В качестве верификации созданного аппарата проверены [2] ЗСЭ, ЗСИ, распределение Максвелла и закон диффузии Эйнштейна.

Получена уточненная формула среднего квадрата смещения частицы в процессе самодиффузии:

$$\left\langle r^2 \right\rangle(t) = 2\tau^2 \left\langle v^2 \right\rangle\left(t/\tau + \exp\left(-t/\tau\right) - 1\right), \tag{4}$$

где $\langle r^2 \rangle$ – средний квадрат смещения частиц, t – время наблюдения, τ – характерное время релаксации системы, $\langle v^2 \rangle$ – средний квадрат скорости частиц.

Результаты проверки формулы (4) представлены на рис. 1.

На основе используемого потенциала (3) предложены две уточненные оценки эффективного газокинетического сечения столкновения:

$$\sigma_1 = \sigma_0 \left(1 + \frac{2}{3T}\right), \tag{5}$$

$$\sigma_2 = \sigma_0 \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 3T/2}}{2}\right)^{-1/3}, \tag{6}$$

где σ_0 – сечение, используемое в курсе общей физики, T – температура системы.

Сравнение расхождения предсказаний, даваемых формулами (5) и (6), с численным экспериментом представлены на рис. 2 и рис. 3.

Таким образом предложены зависимости (4), (5) и (6). С помощью численных экспериментов показано, что формула (4) хорошо описывает начальный участок зависимости $\langle r^2 \rangle(t)$ в отличие от формулы из курса общей физики, формула (6) дает более точную оценку длины свободного пробега частицы (занижение ~ 40% против ~ 60% у формулы из курса общей физики), а формула (5) плохо применима в исследованном диапазоне параметров.

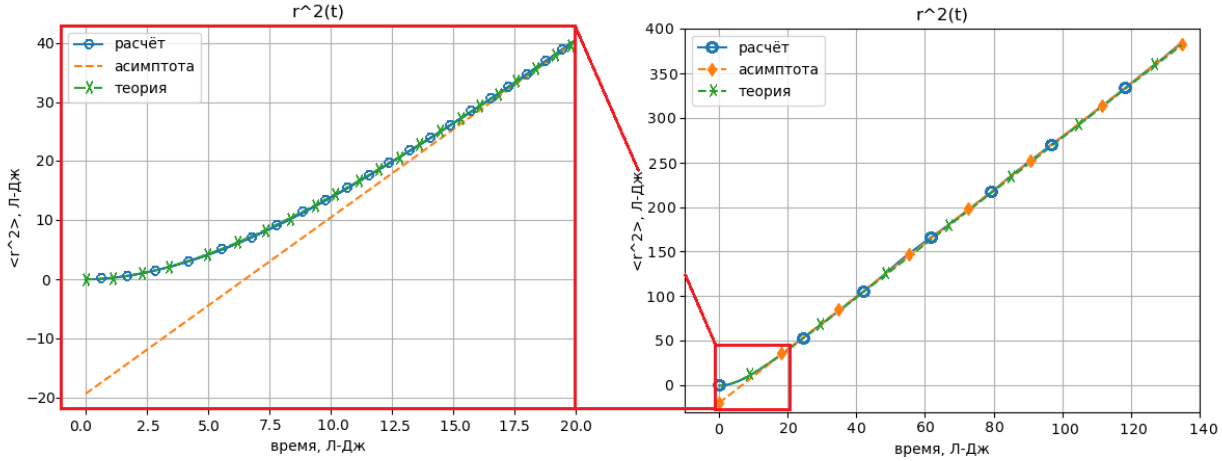


Рис. 1. Сравнение среднеквадратичного смещения диффузии в численном эксперименте с предсказаниями теории, излагаемой в курсе общей физики (линейной асимптотической зависимости), и теории, полученной решением уравнения Ньютона со случайной силой и силой сопротивления ~ –v

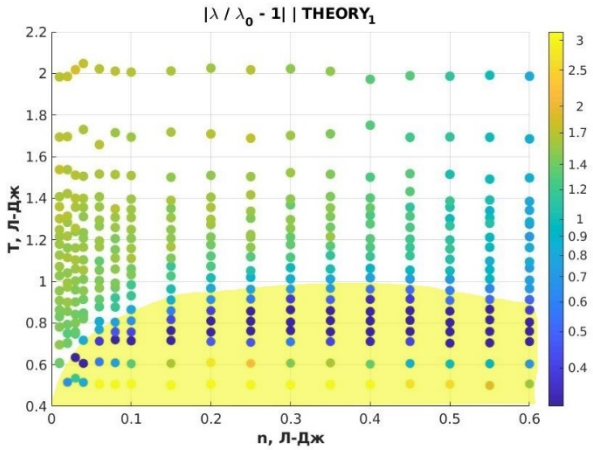


Рис. 2. Относительное отклонение предсказаний формулы (5) от расчётных величин

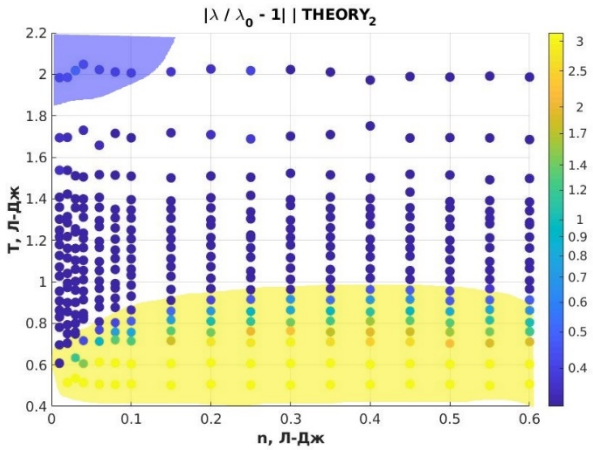


Рис. 3. Относительное отклонение предсказаний формулы (6) от расчётных величин

Авторы выражают благодарность Норману Г.Э. за интересные дискуссии и полезные советы.

Литература

1. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики: учеб. пособие: для вузов. В 5 т. Т. II. Термодинамика и молекулярная физика. 5-изд., испр. М.: Физматлит, 2005. 544 с. ISBN 5-9221-0601-5.
2. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.*. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики. // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 6. С. 3–44.
3. *Самарский А.А.* Введение в численные методы. М.: Наука. 1982. 269 с.

УДК 533.9.01

Решение системы уравнений, моделирующей эффект «ion wake», методом решеточных уравнений Больцмана

Д.А. Колотинский, А.В. Тимофеев

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

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 необходимым является 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 PIC [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 метод заряженной точки [4] – страдающие от недостатка точности. В данной работе для моделирования эффекта «ion wake» численно решается система уравнений, сформулированная в [5]:

$$\Phi_M(v)=\frac{1}{\left(2\pi v_T^2\right)^{3/2}}\exp\left(-\frac{v^2}{2v_T^2}\right) St[f]=-\vartheta f(v)+\vartheta\Phi_M(v)\int f(v')dv',$$

$$v\nabla f+\frac{e}{m}(E_0-\nabla\varphi)\frac{\partial f}{\partial v}=St[f]\nabla E_0-\nabla^2\varphi=\frac{e}{\varepsilon_0}\left[\int f dv-n_e+Q\delta(r)\right].$$

Для ее решения используется метод решеточных уравнений Больцмана [6]. Для верификации расчета проводится сравнение с существующими результатами [4]. Поскольку основная часть расчетов производится с помощью хорошо оптимизированной библиотеки OpenLB с возможностью распараллеливания, то ожидается, что включение эффекта «ion wake» в многомасштабное моделирование пылевой плазмы не приведет к сильному увеличению времени расчета.

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 I. V., Melzer A., Homann A., Piel A.* Alignment and instability of dust crystals in plasmas // Physical review E.1996. P. 4155–4166.
4. *Швейгерт В., Швейгерт В.А., Бедонов В.М.* Неустойчивость и плавление кристалла макрочастиц ЖЭТФ. 1998. Т. 114. № 5(11). С. 1672–1690.
5. *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.
6. *Chen S., Doolen G.D.* Lattice Boltzmann method for fluid flows //Annual review of fluid mechanics. 1998. V. 30. N 1. P. 329–364.

УДК: 538.9

Исследование распределения по скоростям в системе малого числа частиц

В.Д. Негодин, А. В. Тимофеев

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Методами молекулярной динамики [1] смоделирована система частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннард-Джонса:

$$U(\vec{r}_i,\vec{r}_j)=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|}\right)^{6}\right], \quad \textbf{(1)}$$

здесь $U\left(\vec{r}_i,\vec{r}_j\right)$ – потенциальная энергия взаимодействия двух частиц, $\vec{r}_i$, $\vec{r}_j$ – радиус векторы их центров соответственно, ε – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

Взаимодействие частиц рассчитывалось с помощью второго закона Ньютона:

$$m_i\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2}=\sum_{j\neq i}\vec{F}_{ij}, \quad (2)$$

где

$$\vec{F}_{ij}=-gradU\left(\vec{r}_i,\vec{r}_j\right), \quad (3)$$

здесь m_i – масса *i*-й частицы, $\vec{F}_{ij}$ – сила, действующая на *i*-ю частицу, со стороны *j*-й частицы.

В качестве граничных условий рассмотрены две модели: периодически-граничные условия и модель мягких стенок, ограничивающих моделируемое пространство. Потенциальная энергия взаимодействия частицы со стенкой:

$$U(r) = \varepsilon\left(\frac{\sigma}{r}\right)^9. \quad (4)$$

Для верификации модели проверен закон сохранения энергии в системе. Построено распределение по скоростям, проверено соответствие полученного распределения с теоретическим распределением Максвелла:

$$f_v(v_x) = \frac{1}{Z}\cdot\exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right), \quad (5)$$

здесь $f_v(v_x)$ – это плотность вероятности при проекции скорости точки v_x, Z – статистическая сумма, m – масса частицы, k – постоянная Больцмана, T – температура системы. Проверено выполнение закона Эйнштейна для диффузии:

$$\left\langle r^2\right\rangle = 6Dt, \quad (6)$$

где D – коэффициент диффузии, $\left\langle r^2\right\rangle$ – средний квадрат отклонения частицы от начального положения за время t.

Для систем, состоящих из трёх, пяти и семи частиц с разными граничными условиями построены распределения по скоростям, проведено сравнение полученных результатов с распределением Максвелла. На рис. 1 представлены результаты моделирования. Оттенками серого изображены кривые распределений по скоростям в системах с периодически-граничными условиями, а оттенками красного кривые распределений по скоростям в системах с мягкими стенками. Результаты сопоставлены с теоретическими выкладками из [2].

Таким образом, на численном эксперименте показано, что кривые распределений по скоростям в системе малого числа частиц имеют отклонения от теоретических распределений и приближаются к ним при увеличении числа частиц. Также показано, что форма кривой распределения по скоростям зависит от граничных условий.

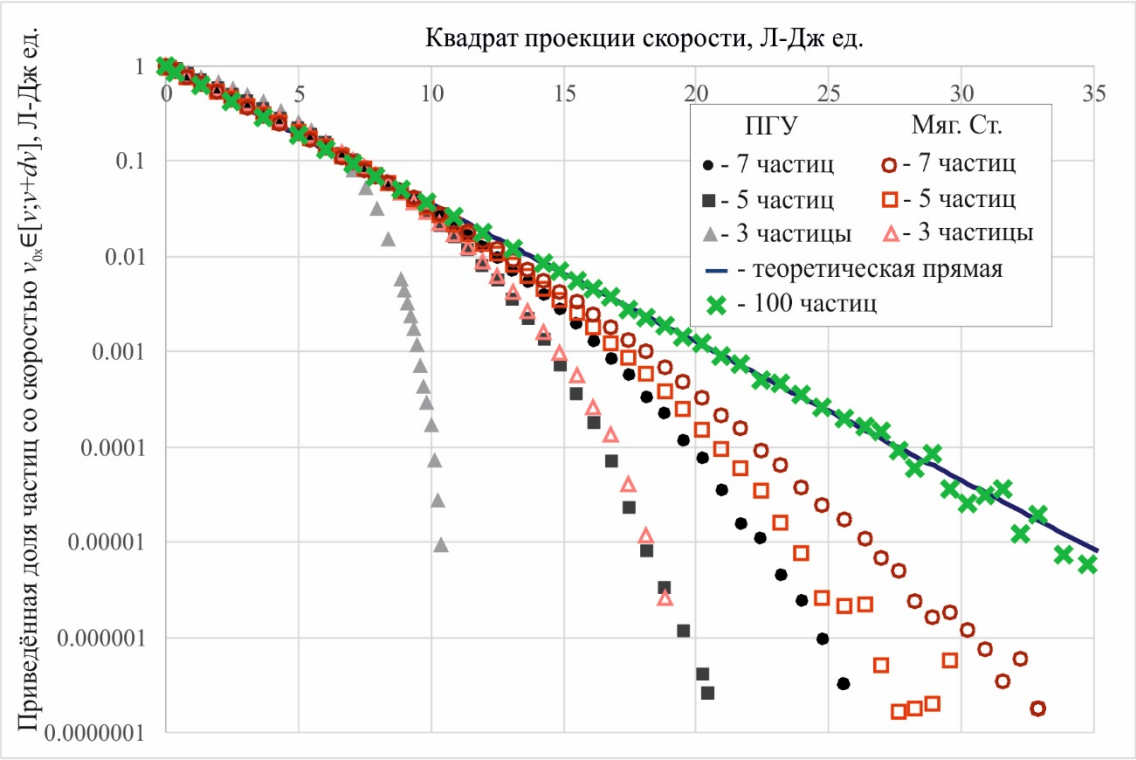


Рис. 1. Распределение по скоростям для систем, состоящих из трёх, пяти и семи частиц и с разными граничными условиями, распределение по скоростям для системы из 100 частиц и теоретическая прямая распределения Максвелла. Средняя кинетическая энергия E = 2.25 Л-Дж ед

Литература

1. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Мат. Мод. 2012. Т. 24, № 8. С. 3–44.

2. *John R. Ray, Graben H.W.* Small systems have non-Maxwellian momentum distributions in the microcanonical ensemble // Phys. Rev. A. 1991. V. 44. N 10. P. 6905–6908.

УДК 538.953

Процессы релаксации распределения по скоростям в классической молекулярно-динамической модели

Е. Чой

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Рассмотрена задача исследования процесса релаксации молекулярно-динамической модели на основе взаимодействия Леннард-Джонсона [1]. Разработана вычислительная программа, моделирующая систему атомов в периодических граничных условиях с использованием схемы Верле [2]. Корректность работы подтверждена выполнением закона сохранения полной энергии системы. Для такой системы реализуется процесс релаксации – установления равновесия системы.

Релаксация молекулярно-динамической системы к равновесию характеризуется приближением распределения по скоростям к распределению Максвелла. Для анализа релаксации системы исследована зависимость от времени относительно разности моментов скоростей из результатов моделирования и аналитических значений [3]:

$$I_n^M = (T/m)^n (n+1)!!,$$

где T – температура, m – масса атома, n – степень момента Максвелла.

Рассчитанную нами зависимость разности моментов от времени можно описать экспоненциальной функцией $A_n e^{t/\tau_n}$, где t – время, A_n и τ_n – коэффициенты аппроксимирующей функции, чему подчиняются отдельные участки графиков моментов. Проведено исследование полученных функций в зависимости от степени моментов и от разных характеристик системы. Получено, что параметр $A_n \sim n^\alpha$, где α – скалярная величина.

На примере рис. 1 изображены первый (а) и второй (б) участки с экспоненциальной зависимостью $A_n e^{t/\tau_n}$ относительной разности значении второго, четвертого, шестого, восьмого и десятого моментов проекции скоростей, полученных усреднением по 250 итерациям для температуры $T = 2{,}8$ и плотности $\rho = 0{,}073$.

На рис. 2 изображена зависимость τ_n от n на участке рис. 1б. Проведен уровень δ^{-1}, аппроксимирующая функция достигает его тем далее по временной оси, чем больше порядок момента n. Результаты рис. 2 позволяют сделать вывод, что с увеличением n соответственно увеличивается значение $\tau_n^\delta \sim \tau_n \ln(n)$.

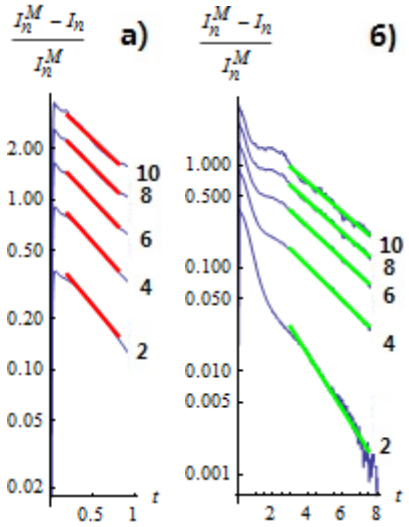


Рис. 1. Пример для $T = 2.8,\ \rho = 0.073$. График моментов относительной разности экспериментальных данных и теоретических от времени в полулогарифмическом масштабе. Сделана аппроксимация по уравнению $(I_n^M - I_n)/I_n^M = A_n e^{t/\tau_n}$ для первого (а) и второго (б) участков. Цифрами обозначены порядки моментов

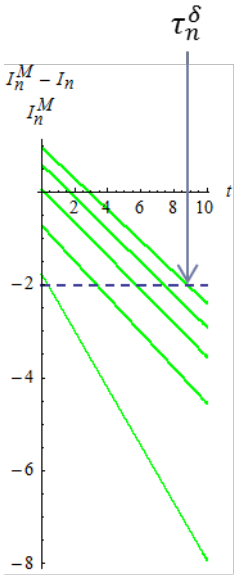


Рис. 2. График зависимостей аппроксимирующей функции $A_n e^{t/\tau_n}$ от времени. На времени τ_n^δ функции достигают уровня $\delta^{-1} = 0.01$

Автор благодарит Г. Э. Нормана за постановку задачи и А. В. Тимофеева за результативные обсуждения.

Литература

1. *Морозов И.В., Норман Г.Э., Смыслов А.А.* Объемная релаксация в простой жидкости // Молекулярно-динамическое моделирование. М. Теплофизика высоких температур, 2008. Т. 46. № 6. С. 836–843.
2. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование 2012. Т. 24. № 6. С. 3–44.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Часть 1, 3-е изд., испр. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1976. 584 с.

УДК 577.345

Сжатие больших данных в микроскопии.

***А.С. Максимов*[1], *D. Rossinelli*[2], *H. Qin*[3], *P. Pantazis*[3,4], *A. Ponti*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Lucid Concepts AG, Switzerland
[3]Swiss Federal Institute of Technology in Zurich, Switzerland
[4]Imperial College London, United Kingdom

В настоящее время во всех сферах деятельности человека производится всё больше и больше данных, не стала исключением и биология. Так, флуоресцентная микроскопия плоскостного освещения (LSM – англ. light sheet microscopy [1], рис. 1) производит терабайты данных за ночь измерений, необходимых для изучения роста эмбрионов.

Такое большое количество информации создаёт проблемы и неудобства в работе с ней, ведь скорость обычного соединения ~ 1 Гбайт/с, так что передача занимает большое время. Также хранение этой информации обходится дорого.

В качестве одного из решений предлагается использовать специализированные алгоритмы сжатия данных. В данной работе был использован алгоритм сжатия изображений компании Lucid Concepts AG, использующий вейвлет-преобразование [2]. Работа алгоритма была проверена на реальных пролонгированных измерениях развития эмбриона рыбы данио-рерио, полученных также в ходе данной работы.

Были использованы два типа мечения клеток эмбриона: фотоконвертация (все клетки эмбриона начинают флуоресцировать красным светом в дополнение к обычному зеленому) и праймированная конвертация [3] (красными становятся только одна или несколько клеток на пересечении праймирующих лучей). Первый способ полезен для лучшей детекции всех клеток и определения клеточной динамики по уменьшению сигнала флуоресценции, второй – для мечения определенных клеток и слежения за их судьбой.

В результате для оценки качества изображения после процедуры сжатия-распаковки было посчитано количество клеток, детектируемое на изображении (с помощью программного пакета Imaris). Используя эти данные (рис. 3), можно оценить максимально допустимое сжатие данных.

Также был опробован режим сжатия без потерь, дающий выигрыш в 2,5–3,0 раз. Скорость распаковки превышает 10 Гб/с, скорость сжатия колеблется в районе 1,5–2,5 Гб/с, что больше скорости получения информации и позволяет обрабатывать данные «на лету».

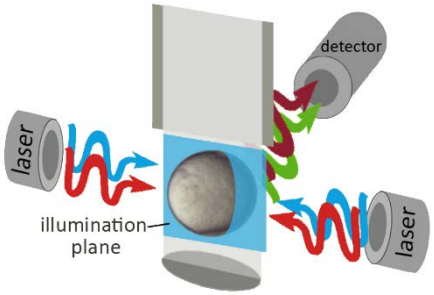


Рис. 1. Общая схема флуоресцентной микроскопии плоскостного освещения

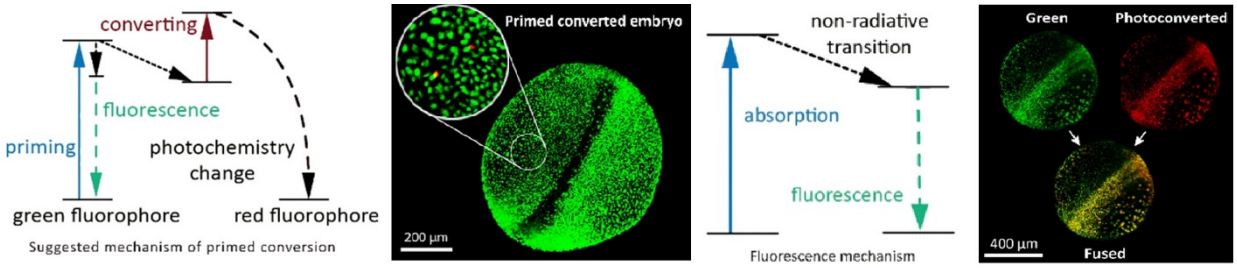


Рис. 2. Механизмы и примеры мечения техниками фотоконвертации и праймированной конвертации

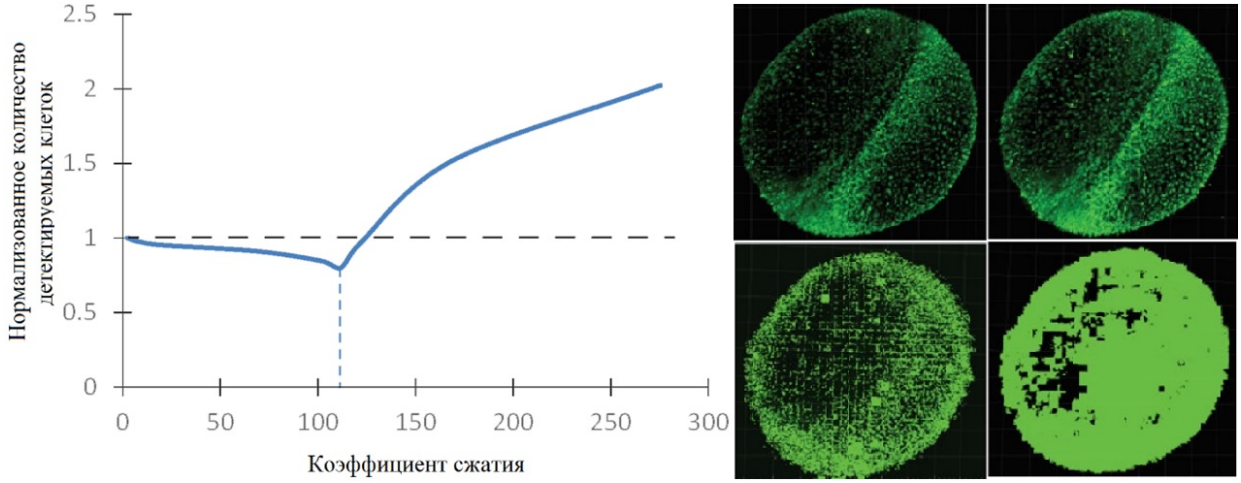


Рис. 3. Слева – полученная зависимость оценки качества сжатия от его величины. Среди рисунков справа сжатие растёт слева направо и сверху вниз

Литература

1. *Keller P.J.* Reconstruction of Zebrafish Early Embryonic Development by Scanned Light Sheet Microscopy // Science. 2008. V. 322. I. 5904. P. 1065–1069.
2. *Shapiro J.M.* Embedded image coding using zerotrees of wavelet coefficients // IEEE Transactions on Signal Processing. 1993. V. 41. I. 12. P. 3445–3462.
3. *Dempsey W.P.* [*et al.*] *In vivo* single-cell labeling by confined primed conversion // Nature Methods. 2015. 12. P. 645–648.

СЕКЦИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СИСТЕМАХ

Председатель: О.В. Астафьев (профессор)

Зам. председателя: И.Н. Храпач (Ph.D, к.ф.-м.н.)

Секретарь: А.В. Кулавкова

Дата: 23.11.2018

Время: 11:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 2, ауд. 409 ЛК, МФТИ

УДК 530.145

Адаптация метода теневого напыления для изготовления высококогерентных сверхпроводящих структур

***Д.А. Калачева*[1,2], *Г.П. Федоров*[1,2], *А.В. Кулакова*[1], *Ю.И. Зотова*[1,3], *И.Н. Храпач*[1,2]**

[1] Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Российский квантовый центр
[3] RIKEN, Center for Emergent Matter Science, Wako, Japan

Сверхпроводящие резонаторы с высокими добротностями вызывают значительный интерес во многих сферах, включая фотонные детекторы для астрофизических применений [1], параметрические усилители, СВЧ-фильтры, а также в области квантовой информатики, где микроволновые резонаторы играют чрезвычайно важную роль в конструкции высококогерентных сверхпроводящих структур [2], например для дисперсионного считывания состояния кубита [3].

В большинстве применений сверхпроводящих резонаторов требуется, чтобы они имели высокую добротность. Однако последняя может быть ослаблена многими факторами, такими как флуктуации двухуровневых систем на уровне металл-подложка или подложка-воздух [4] и потери энергии из-за связи с внешней средой, такие как абрикосовские вихри и диссипация из-за неравновесных квазичастиц.

Все эти потери ограничивают коэффициент добротности резонатора и, следовательно, производительность других устройств, которые соединяются с этими резонаторами. Кроме того, если резонаторы изготовлены по той же технологии и из тех же материалов, что и кубиты на чипе, то по добротности резонаторов можно судить о времени когерентности кубитов.

В процессе выполнения данной работы были созданы технологии, основанные на методе теневого напыления, позволяющие изготавливать различные типы резонаторов, используемых в разработке квантовых структур. Такой комплекс технологий дает возможность получать компактные высокоиндуктивные копланарные резонаторы из тонких пленок алюминия толщиной порядка 10 нм, а также позволяет изготавливать высокодобротные резонаторы из более толстых пленок алюминия или ниобия толщиной около 100 нм. Рассмотренные технологии хорошо достигают целей поставленных задач в получении добротностей порядка 10^5 и являются наиболее подходящими для дальнейшего изучения сверхпроводящих структур при температурах порядка десятков мК.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов ФПИ (шифр «Лиман»).

Литература

1. *Zmuidzinas J.* [*et al*.]: A broadband superconducting detector suitable for use in large arrays // Nature. 2003. 425. 817.
2. *Ladd T. D.* [*et al.*]*:* Quantum computers // Nature. 2010. 464. 45.
3. *Wallraff A.* [*et al.*]: Strong coupling of a single photon to a superconducting qubit using circuit quantum electrodynamics // Nature. 2004. 431. 162.
4. *Pappas David P.* [*et al.*]: Two Level System Loss in Superconducting Microwave Resonators // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. 2011. V. 21. N 3.

УДК 538.945

Взаимодействие вихрей Абрикосова с искусственным массивом сверхтвердых ферромагнитных ловушек

***Р.А Оганнисян*[1], *И.А. Головчанский*[1,2], *В.С. Столяров*[1,2,3], *В.В. Дремов*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
[3]Институт физики твердого тела РАН
[4]MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente

Исследовалось магнетосопротивление гетеросистемы сверхпроводник/ферромагнетик. (рис. 1а). Исследуемый образец представлен сверхпроводящей ниобиевой тонкой пленкой длиной 250 мкм, шириной 100 мкм и толщиной 100 нм, нанесенной непосредственно на массив ферромагнитных треугольных островков FePt, изготовленных в виде прямоугольной решетки периодом $l_b = 1.1 \pm 0.05$ мкм, а размер самих треугольников равен $l_{tr} = 0.6 \pm 0.05$ мкм. При этом островки характеризуются сверхвысокой одноосной перпендикулярной магнитной анизотропией и коэрцитивной силой порядка 5 Т.

На рис. 1б изображены зависимости сопротивления от магнитного поля образца при разных значениях сверхпроводящего тока. Как можно заметить, есть четыре особенности в виде резкого уменьшения магнетосопротивления в полях 0, 7,7, 15,4, 23,1 Ое. Для объяснения особенностей были произведены исследования образца методом магнитно-силового микроскопа (МСМ) рис. 1в, г, д, е.

Измерения проводились с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) AttoCube AttoDry 1000 с криогенной системой замкнутого цикла, обеспечивающей базовую температуру 4 К.

Из сравнения транспортных и МСМ измерений можно сделать вывод что особенности, замеченные в транспортных измерениях, являются следствием так называемого эффекта *вихревого совпадения* (совпадения решетки Абрикосовких вихрей и искусственной решетки. При полях вихревого совпадения обнуляется вклад, связанный с движением вихрей [1–7]. Поля 7,7 и 15,4 Ое соответствуют моменту, когда в каждом узле находится один и два вихря соответственно. Более сложным является поле 23,1 Ое. В этом поле, как можно заметить, с МСМ изображений на каждом островке находится два вихря, а в центре каждого кластера еще один вихрь который пиннингован за счет магнитостатического взаимодействия с островками, а также отталкивания от других вихрей. В нулевом поле после режима становится энергетически выгодным существование антивихря в сверхпроводнике и вихря на островках. При этом количество вихрей и антивихрей совпадают что и приводит к снижению магнетосопротивления, что и объясняет особенности в нулевом поле, замеченные в транспортных измерениях.

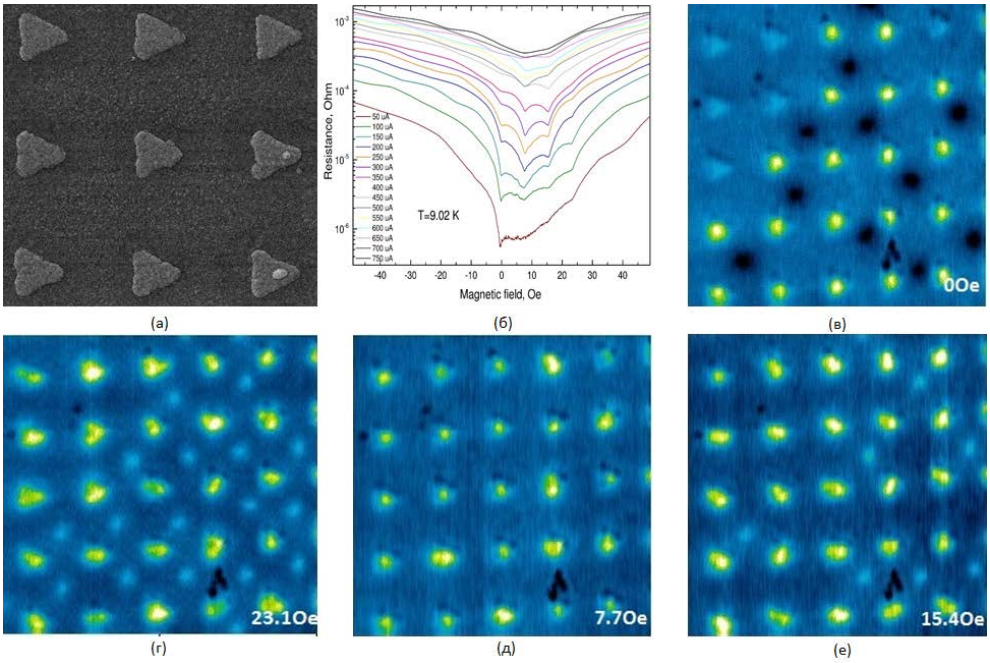


Рис. 1. (а) РЕМ изображение исследуемого образца; (б) магниторезистивности при разных значениях тока; (в,г,д,е) структуры магнитного потока образца при полях 0, 7.7, 15.4, 23.1 Ое соответственно.

Литература

1. *Milosevic M.V., Yampolskii S.V., and Peeters F.M.* // Physical Review B. 2002. 66. 174519.
2. *Mel'nikov A.S., Nozdrin Yu.N., Tokman I.D., and Vysheslavtsev P.P.* // Phys. Rev. B. 1998. 58. 11. 672.
3. *Wei J.C., Chen J.L., Horng L., and Yang T.J.*, Phys. Rev. B. 1996. 54. 15. 429.
4. *Bulaevskii L.N., Chudnovsky E.M., and Maley M.P.* // Appl. Phys. Lett. 2000. 76. 2594.
5. *Martin J.I., Velez M., Nogues J., and Schuller I.K.* // Phys. Rev. Lett. 1997. 79. 1929.
6. *Van Bael M.J., Van Look L., Temst K., Lange M., Bekaert J., Guentherodt G., Moshchalkov V.V.*, and Bruynseraede Y. // Physica C. 2000. 332. 12.
7. *Lange M., Van Bael M.J., Van Look L., Temst K., Swerts J., Guentherodt G., Moshchalkov V.V., and Bruynseraede Y.* // Europhys. Lett. 2001. 53. 646.

УДК 538.945

Z-импульсы на трансмонах

Е.Ю. Егорова[1,2], **Г.П. Федоров**[1,2], **И.Н. Храпач**[1], **В.И. Чичков**[3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]НИТУ МИСиС

Гамильтониан свободного трансмона в двухуровневом приближении может быть записан как

$$\hat{H} = \hbar \frac{\omega_{ge}}{2} \hat{\sigma}_z, \tag{1}$$

где ω_{ge} – частота между основным и первым возбужденным состоянием (далее – частота кубита).

При подаче импульсов тока на потоковую линию смещения (DC-линии потока) меняется джозефсоновская энергия кубита, а значит, и частота кубита, вследствие чего наблюдается вращение на сфере Блоха во вращающемся базисе. Гамильтониан, переписанный с новой частотой, выглядит как

$$\hat{\tilde{H}} = \hbar \frac{\tilde{\omega}_{ge}}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (2)$$

При выборе частотного сдвига и длительности импульса можно получить вращение на определенный угол на сфере Блоха:

$$\varphi = t(\tilde{\omega}_{ge} - \omega_{ge}). \quad (3)$$

Произведена перестройка частоты кубита с помощью DC-линии потока (рис. 1).

В виде результатов представлены картины перестройки кубитов с различными напряжениями Z-импульса, а также бахрома Рамзи, и проведено сопоставление результатов с компьютерным моделированием.

В работе также представлена некоторая информация о расчете аттенюации DC-линии и взаимной индуктивности кубита с DC-линией. Найденная экспериментально взаимная индуктивность сопоставлена с теоретически рассчитанной.

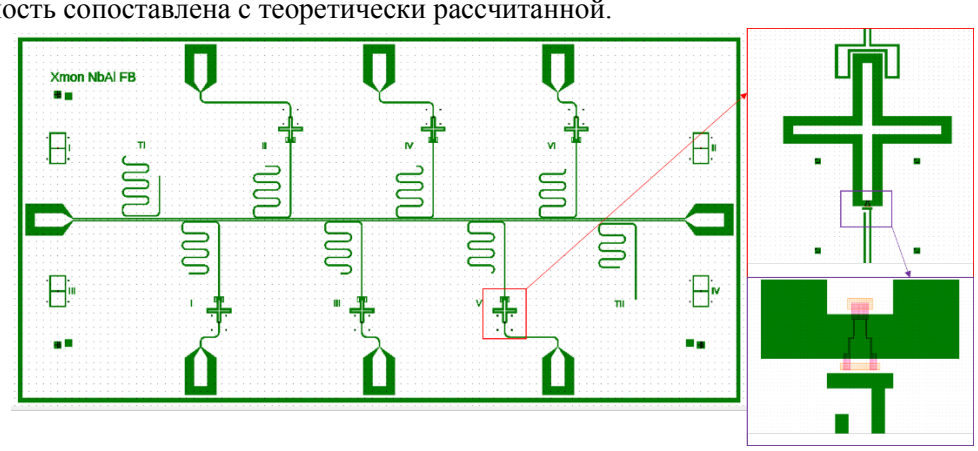


Рис. 1. Дизайн чипа, содержащий линию передачи, резонаторы, кубиты и DC-линии потока. На увеличенных фрагментах изображены СКВИД (розовый цвет) и подходящая к нему DC-линия потока.

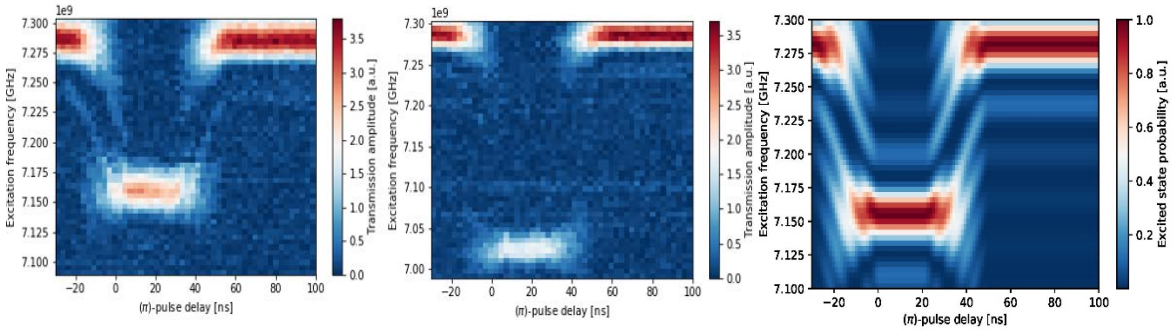


Рис. 2. Z-импульсы при разных напряжениях (последовательно слева-направо 15 мВ и 30 мВ) и моделирование импульса при напряжении 15 мВ

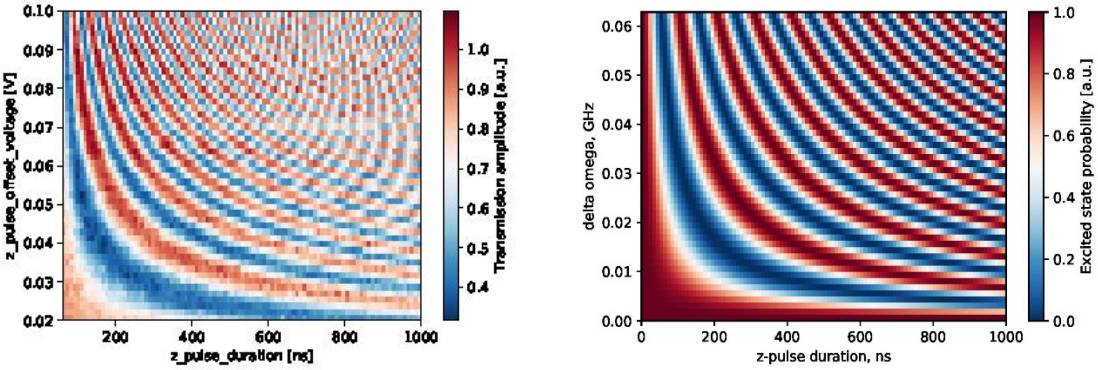


Рис.3. Бахрома Рамзи (слева) и ее моделирование (справа).

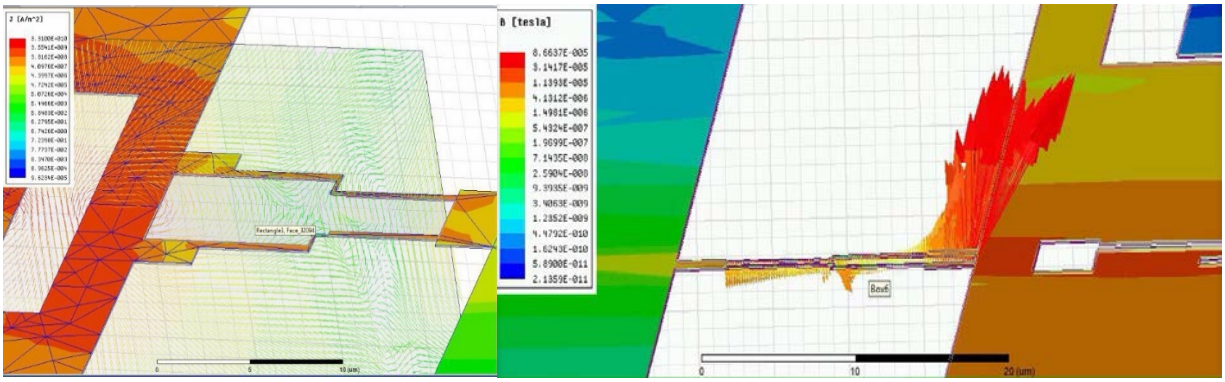


Рис. 4. Моделирование распределение тока и магнитной индукции вблизи СКВИДа и DC-линии потока

Работа выполнена при поддержке проектом 5-100.

Литература

1. *Johnson B.R.* Controlling photons in superconducting electrical circuits (Yale University, 2011).

УДК 537.9

Разработка однофотонного детектора микроволнового диапазона частот

***В.Б. Лубсанов*[1], *В.Л. Гуртовой*[1,2], *А.В. Семенов*[3,1], *О.В. Астафьев*[1,4]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов
[3]Московский педагогический государственный университет
[4]Physics Department, Royal Holloway University of London, Egham

Однофотонные (SP) источники и детекторы являются ключевыми элементами для квантово-оптических экспериментов на чипе, включая сэмплинг бозонов, квантовые симуляции, линейные оптические квантовые вычисления. В отличие от разработанных однофотонных источников и детекторов в оптическом и инфракрасном диапазоне частот, прогресс устройств в микроволновом диапазоне более сложный из-за меньшей на четыре порядка энергии фотонов. В последнее время достигнут значительный прогресс в создании однофотонного микроволнового источника [1], но по-прежнему отсутствуют публикации по широкополосным (10–100 ГГц) микроволновым однофотонным детекторам (MSPD).

Наша идея MSPD основана на пороговом поглощении фотона ($h\nu > 2\Delta(T = 0) = 3.52T_{c1}$) в сверхпроводящем наномостике с низкой критической температурой $T_{c1} \sim 0.1$ К, что соответствует пороговой частоте фотонов ~ 7 ГГц. Наномостик встроен в сверхпроводящую копланарную линию с критической температурой материала линии $T_{c2} >> T_{c1}$, при этом поглощение фотона наномостиком приводит к уменьшению на единицу количества сверхпроводящих пар на нем и, следовательно, к небольшому изменению кинетической индуктивности системы при относительно малом числе куперовских пар в наномостике. Предполагается, что данное изменение индуктивности можно зарегистрировать в режиме отражения дополнительного тестового сигнала с частотой $f < 2\Delta(T = 0)/h = 3.52T_{c1}$. В качестве материала наномостика MSPD протестированы иридиевые, золото-молибденовые (Au-Mo) и платино-титановые (Pt-Ti) двухслойные плёнки с различной толщиной слоёв. Результаты измерений электронного транспорта в наноструктурах показывают, что двухслойные плёнки Pt-Ti с $T_c \sim 0{,}15$–$0{,}2$ К лучше всего подходят в качестве материала для MSPD. Предварительные микроволновые измерения Pt-Ti MSPD-структур демонстрируют правильное поведение амплитуды и фазы отражённого тестового сигнала в зависимости от температуры образца (вблизи T_{c1}) и мощности детектируемого СВЧ-сигнала. Полученные структуры Pt-Ti также демонстрируют частотно-пороговое поглощение СВЧ-мощности (P), что

проявляется в различной функциональной зависимости фазы отражённого тестового сигнала от мощности детектируемого (фаза ~ P^2 ниже 9 ГГц и фаза ~ P выше 9 ГГц).

Полученные результаты перспективны для дальнейшего развития и оптимизации MSPD-структур.

Литература

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.

УДК 538.915

Измерение частотных характеристик кинетической индуктивности в сверхпроводящих пленках

***К.В. Шеин*[1], *А.А. Заруднева*[1], *В.В. Завьялов*[1,2,3], *К.Ю Арутюнов*[1,2]**

[1] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт физических проблем им. П.Л. Капицы, РАН
[3]Московский физико-технический институт (государственный университет)

В научных экспериментах часто используют высокочастотные электрические схемы, существенными составляющими которых являются индуктивные и емкостные элементы. Индуктивность катушки линейно зависит от ее геометрических параметров, то есть проблематично сделать катушку индуктивности достаточно малых размеров с большой индуктивностью.

Наряду с известной всем магнитной (геометрической) индуктивностью L_m любой проводник также имеет так называемую *кинетическую индуктивность* L_K. В отличие от L_m кинетическая индуктивность L_K возникает не из-за запасенной магнитной энергии, а из-за сохранённой энергии движения носителей заряда.

В несверхпроводящих наноструктурах резистивная составляющая доминирует над кинетической индуктивностью, так как в таких структурах происходит сильная диссипация энергии. Однако в сверхпроводящих наноструктурах при температуре, ниже критической T_c , резистивная часть импеданса становится равной нулю и преобладает кинетическая составляющая индуктивности.

Кинетическая индуктивность сверхпроводящего плотноупакованного (для компактности) меандра может быть рассчитана из простых соображений: приравняем общую кинетическую энергию куперовских пар E_K и запасенной энергией магнитного поля E_L:

$$E_L = \frac{L_k I^2}{2}, \tag{1}$$

$$E_K = \frac{ns(lwd)2mv^2}{2}, \tag{2}$$

$$L_K = \frac{ml}{2wde^2 n_s}, \tag{3}$$

здесь I – сверхпроводящий ток куперовских пар, n_s – концентрация куперовских пар, $2m$ – масса куперовской пары, v – средняя скорость куперовских пар, lwd – (длина, ширина, толщина) меандра.

В статьях [2, 3] была выведена формула (4) для кинетической индуктивности в таком виде:

$$L_K(T) = \frac{\mu_0 \lambda^2(T) l}{d}, \tag{4}$$

здесь λ – глубина проникновения магнитного поля, μ_0 – магнитная постоянная.

В данной работе используются сверхпроводящие меандры NbN (Рис.1,2) длинной l = 0,005 м и шириной w = 100 нм.

Плёнка NbN осаждалась на подложку Si, поверх которой был нанесён слой Si3N.

Rs = 670 Ом/кв., критическая температура T_C = 7,66 K, dT_C = 0,53 K, коэффициент металличности *K* = 0,65.

В дальнейшем в данной работе будет измеряться сопротивление меандра и АЧХ по тому же принципу, как это происходило в работе [1].

Также в будущем, как альтернатива NbN, будут измеряться пленки Ti.

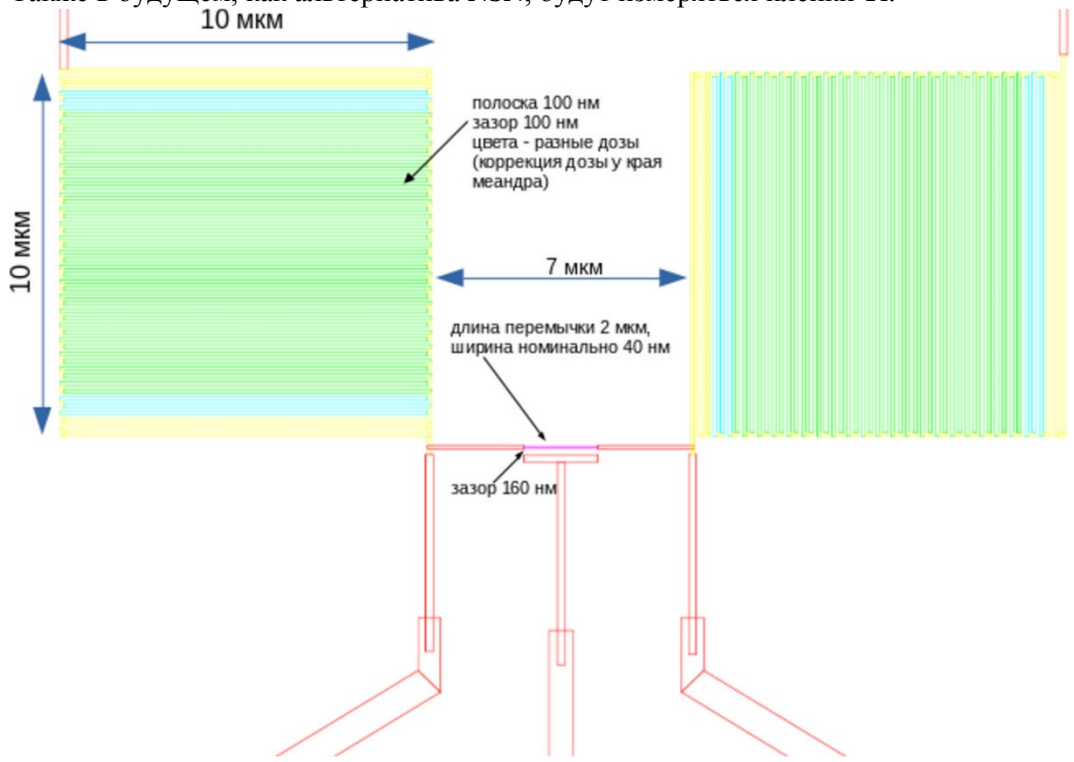


Рис. 1. Схема структуры с указанием размеров

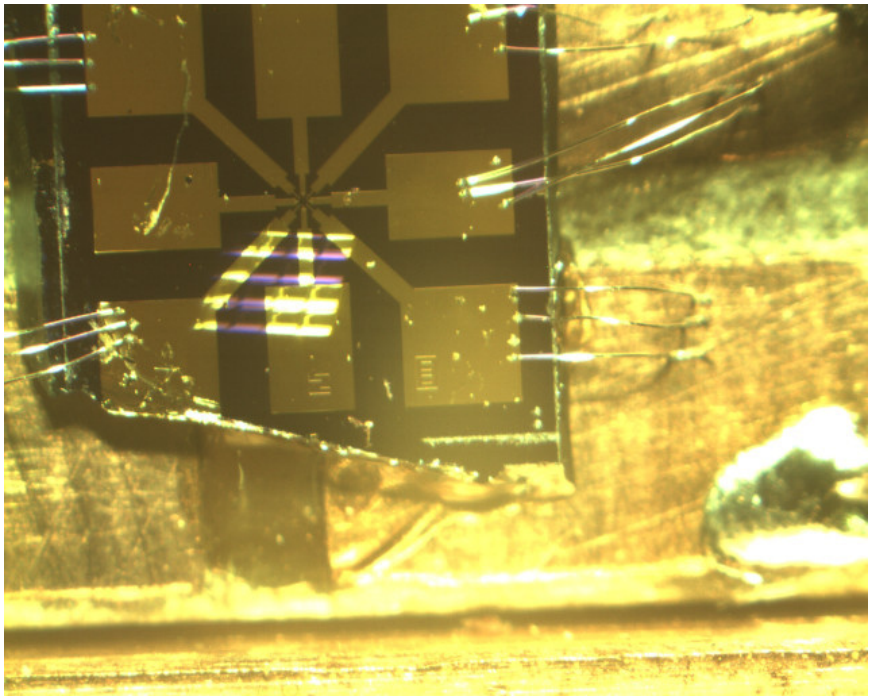


Рис. 2. Фотография микроструктуры

В работе использованы материалы проекта ТЗ-93 «Квантовые твердотельные системы» в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики (НИУ ВШЭ)» с использованием средств субсидии на государственную поддержку ведущих научных университетов Российской Федерации в целях повышения их

конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, выделенных НИУ ВШЭ.

Литература

1. *Zavyalov V.V., Chernyaev S.A., Shein K.V., Shukaleva A.G. and Arutyunov K.Yu.* Examination of cryogenic filters for multistage RF filtering in ultralow temperature experiments // J. Phys. 2018. CS **969**. 012086.
2. *Annunziata A.J., Santavicca D.F., Chudow J.D., Frunzio L., Rooks M.J., Frydman A. and Prober D.E.* // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2009. 19. 327-31.
3. *Leoni R., Mattioli F., Castellano M.G., Cibella S., Carelli P., Pagano S., Perez de Lara D., Ejrnaes M., Lisitskyi M.P., Esposito E., Cristiano R. and Nappi C.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2006. 559. 564-6.

СЕКЦИЯ НАНООПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ

Председатель: Е.А. Виноградов (д.ф.-м.н., член-корр. РАН, профессор РАН)

Зам. председателя: Ю.Г. Вайнер (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: А.В. Летохова

Дата: 23.11.2018

Время: 10:00-16:00

Место: г. Троицк, Московская обл., ул. Физическая, д. 5, ИСАН

УДК 544.032.65

Динамика образования иона XeI^+ при ионизации смешанных кластеров $(CF_3I)_n(Xe)_m$

***О.С. Аблясова*[1], *Д.Г. Пойдашев*[2], *В.О. Компанец*[2], *С.В. Чекалин*[2], *Е.А. Рябов*[2].**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт спектроскопии РАН

Представленные исследования направлены на решение одной из фундаментальных проблем спектроскопии и молекулярной физики, связанной с исследованием молекулярных кластеров, – изучение оптических и спектральных свойств этих частиц, а также динамики фотоиндуцированных процессов в них. Исследование в реальном времени динамики внутренних процессов в молекулярных кластерах (возбуждение частиц, миграция энергии, фотоиндуцированные процессы, включая диссоциацию и химические реакции внутри и на поверхности кластеров), индуцированных фемтосекундным лазерным излучением, представляется одним из перспективных направлений исследований в рамках отмеченной проблемы.

В качестве объекта исследования выбраны смешанные кластеры $(CF_3I)_n(Xe)_m$.

В данной работе выполнялись исследования динамики образования иона XeI^+ при ионизации смешанного кластера $(CF_3I)_n(Xe)_m$ ультракороткими УФ лазерными импульсами на длине волны λ = 266 нм. В качестве источника кластерных пучков использовалось импульсное сопло. Детектирование кластеров и продуктов их распада осуществлялось при их многофотонной ионизации фемтосекундными лазерными импульсами с помощью времяпролетного масс-спектрометра.

В работе использовался «pumb-probe» метод, при котором импульс накачки имел длину волны λ = 266 нм и длительностью 2,2 пс, а импульс зондирования – λ = 400 нм и длительностью 100 фс. Импульс накачки осуществлял ионизацию смешанных кластеров и инициировал образование иона XeI^+, а зондирующий импульс осуществлял однофотонную фрагментацию иона XeI^+. Данный метод позволяет получить информацию о динамике образования молекулярного иона XeI^+ благодаря процессу его распада с образованием иона Xe^+ и нейтрального атома йода.

Характерный масс-спектр продуктов ионизации, образующихся при многофотонной ионизации кластеров $(CF_3I)_nXe_m$ лазерным излучением при длине волны λ = 266 нм с различной длительностью импульса, осуществляющего ионизацию, показан на рис. 1. Можно сделать вывод, что значительную долю сигнала, появившегося при использовании «растянутых» УФ-импульсов, составляет сигнал от ионов XeI^+. Таким образом, были найдены условия, при которых возможно детектирование иона XeI^+.

Для выделения сигнала от ионов, пики которых в масс-спектре значительно перекрываются, требуется использовать моделирование. С помощью языка программирования MATLAB для каждого значения времени задержки между импульсом накачки и зондирующим импульсом из масс-спектра был выделен сигнал от ионов Xe^+, образующихся по интересующему нас каналу (в

расчёт включены основные изотопы Xe с массами 128, 129, 130, 131, 132, 134 и 136 а.е.м.), что позволило извлечь кинетику иона Xe^+ (см. рис. 2).

Кинетика на рис. 2 содержит характерный пик в области пересечения лазерных импульсов и последующий монотонный рост вплоть до величины задержки между лазерными импульсами, равной 200 пс. Этот рост можно приблизить экспоненциальной функцией вида $f(t) \sim 1 - \exp(-t/\tau_0)$ с постоянной $\tau_0 = 65 \pm 13$ условных единиц. Таким образом, в условиях данного исследования было определено характерное время образования иона XeI^+ при УФ ионизации смешанных кластеров $(CF_3I)_nXe_m$.

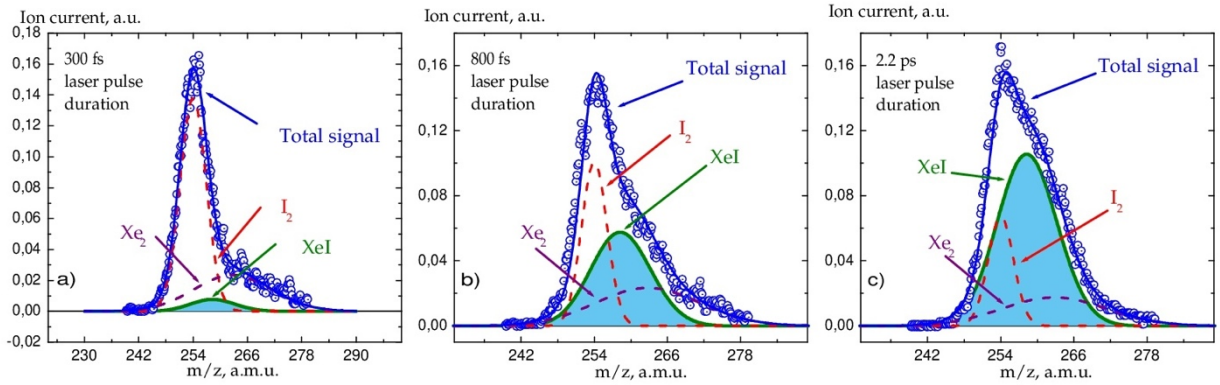


Рис. 1. Масс-пики в диапазоне масс [240; 280], образующиеся при ионизации смешанного кластера $(CF_3I)_nXe_m$ лазерными импульсами на длине волны λ = 266 нм с различной длительностью импульса

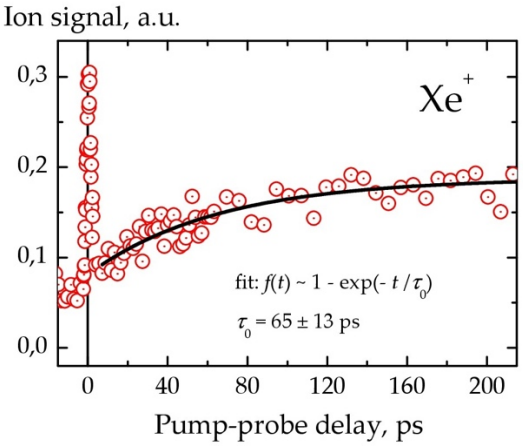


Рис. 2. Кинетика выхода ионов Xe^+ при двухимпульсном зондировании кластера $(CF_3I)_nXe_m$

УДК 535-3

Оптические и механические свойства тонкопленочных покрытий на основе одностенных углеродных нанотрубок

***В.М. Губарев*[1], *В.В. Медведев*[1,2], *В.Ю. Яковлев*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт спектроскопии РАН
[3]Сколковский институт науки и технологий

В данной работе исследуются перспективы применения тонких пленок толщиной d ~40 нм на основе углеродных одностенных нанотрубок (SWCNT) для коротковолновой оптики. Примером применения тонких пленок может служить EUV литография, где пленка помещается перед маской для предотвращения её загрязнения [1]. Данное применение требует от защитного покрытия высокого значения коэффициента пропускания в коротковолновой области и способности сохранять упругие свойства в широком диапазоне нагрузок.

SWCNT-пленки изготавливаются аэрозольным методом химического осаждения (CVD). На рис. 1 представлено SEM-изображение случайно ориентированных одностенных углеродных нанотрубок, полученных CVD-методом на кремниевой подложке. SWCNT-пленки обладают уникальными механическими и оптическими свойствами: 1) к ним неприменимо понятие хрупкости, 2) структура пленок позволяет задерживать частицы с латеральными размерами ~ 5 мкм, 3) относительно низкие сечения поглощения атомов углерода на коротких длинах волн позволяют достичь высокого значения коэффициента пропускания. Описанные свойства SWCNT-пленок делают их привлекательными для использования в коротковолновой оптике, например, в качестве защитных мембран в EUV литографии.

Измерения спектра пропускания образцов проводились с использованием *s*-поляризованного синхротронного излучения на установке BESSY-II [2]. Измеренный спектр пропускания сравнивался с модельными расчетами с использованием уравнения (1):

$$T = \left| \frac{4n \exp\left(2\pi nd / \lambda\right)}{\left(1+n\right)^2 - \left(1-n\right)^2 \exp\left(2\pi nd / \lambda\right)} \right|^2, \qquad (1)$$

где $n = 1 - \frac{r_0 \lambda^2}{2\pi} N_{at} \left(f_1 - i f_2 \right)$.

В этом уравнении n – комплексный показатель преломления, d – толщина пленки, $f = f_1 - i f_2$ коэффициент атомного рассеяния, N_{at} – атомная концентрация. рис. 2. показывает экспериментально измеренный (фиолетовая линия) и теоретически рассчитанный (серая пунктирная линия) спектр пропускания пленки толщиной d = 30 нм и $\rho = 1.43$ г/см^3. В области длин волн ~ 5 мкм наблюдается уменьшение пропускания, связанного с K-фотопоглощением углерода. Важным результатом является высокое значение коэффициента пропускания T > 80% во всей коротковолновой области.

Для исследования механических свойств SWCNT-пленки применялся «bulge» тест. На рис. 3. схематически показана экспериментальная установка. Под воздействием разницы давлений в камерах V_1 и V_2 пленка 3 прогибалась. По изменению положения отраженного лазерного луча на экране 1 от прогнувшейся пленки вычислялось значение стрелки прогиба.

При малых деформациях форма искривленной пленки может быть аппроксимирована сферой радиуса R. Тогда относительное растяжение пленки можно вычислить согласно формуле:

$$\varepsilon = \frac{2}{3a^2}(h^2 - h_0^2), \qquad (2)$$

где a – радиус пленки, $h = f\left(R\right)$ – прогиб пленки, вызванный перепадом давления, h_0 – изначальное провисание пленки при $\Delta P = 0^+$ *Па*.

Возникающее при этом напряжение в пленке определяется в виде

$$\sigma = \frac{\Delta P R}{2d}. \qquad (3)$$

Для упругих материалов уравнения (2) и (3) позволяют рассчитать значение биаксиального модуля Y согласно формуле:

$$\sigma = Y\varepsilon. \qquad (4)$$

На рис. 4. показана экспериментально полученная зависимость σ от ε для SWCNT-пленки толщиной 40 нм в диапазоне 0–100 Па. В области линейной деформации $\varepsilon < 0.001$ значение биаксиального модуля SWCNT-пленки, рассчитанного по формуле (4), составляет $Y = 24.52 \pm 1.01$ ГПа. Пластическая деформация происходит при давлении 80 Па, что соответствует напряжению $\sigma = 0.052$ ГПа. Дальнейшее повышение давления позволило определить давление, соответствующее прочности на разрыв $\Delta P = 5.3$ КПа.

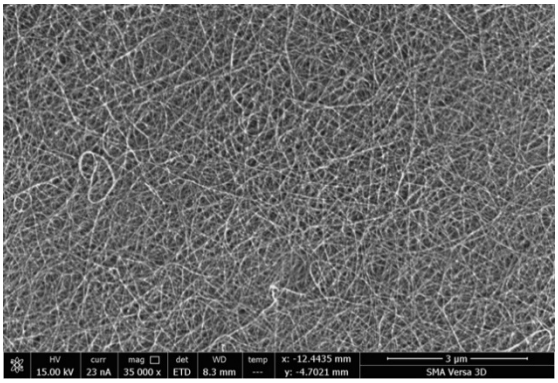


Рис. 1. SEM – изображение SWCNT-пленки, полученной CVD-методом

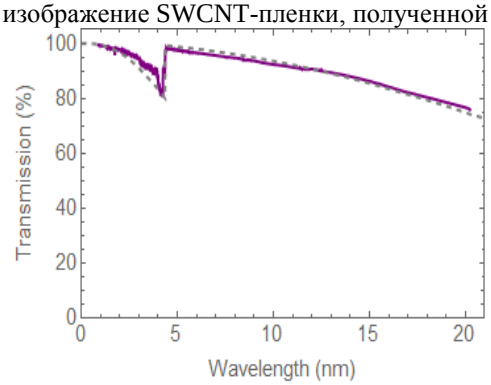


Рис. 2. Фиолетовая линия – экспериментально измеренный спектр пропускания SWCNT пленки толщиной 40 нм. Серая пунктирная линия – теоретически рассчитанный спектр пропускания SWCNT

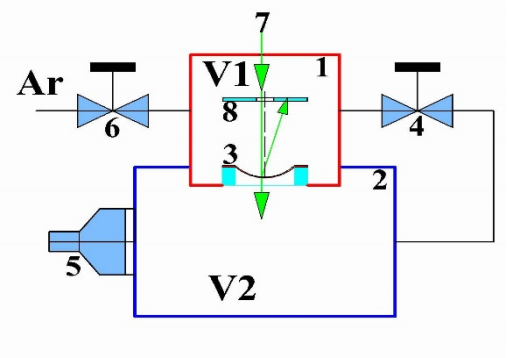


Рис. 3. Экспериментальная установка для определения механических свойств SWCNT-пленок

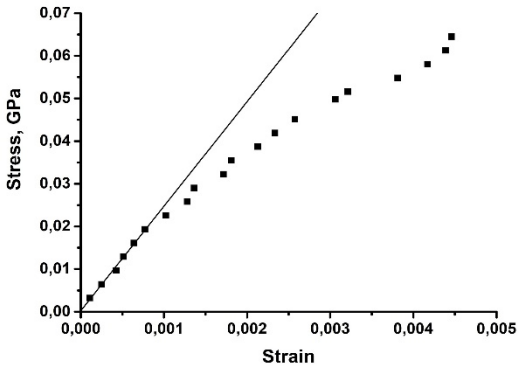


Рис. 4. Экспериментально измеренная stress-strain кривая для SWCNT-пленки толщиной 40 нм

Литература

1. *Asbach C., Fissan H., Kim. J. H, Yook S.-J. and Pui D. Y. H.* // J. Nanoparticle Res. 2006. 8. 705.
2. *Schäfers F., Bischoff P., Eggenstein F., Erko A., Gaupp A., Künstner S., Mast M., Schmidt J.-S., Senf F., Siewert F., Sokolov A., and Zeschke T.* // J. Synchrotron Radiat. 2016. 23. 67.

Локализация атомов импульсным полем фемтосекундной длительности

***А.А. Мейстерсон*[1,2], *А.Е. Афанасьев*[1], *А.Ю. Калатский*[1], *П.Н. Мелентьев*[1], *В.И. Балыкин*[1]**

[1] Институт спектроскопии РАН
[2] Московский физико-технический институт (государственный университет)

Атомные дипольные ловушки играют важную роль в фундаментальных исследованиях и имеют множество прикладных аспектов. Например, создание оптических атомных часов для прецизионных экспериментов и кубитов для квантовой информации [1]. В основном дипольные ловушки для нейтральных атомов формируются с использованием излучения непрерывных лазеров. Это ограничивает реализацию высокоточной спектроскопии локализованных атомов в силу спектральных сдвигов и уширения, вызванных переменным эффектом Штарка [2]. Кроме того, взаимодействие локализованного атома с локализующим потенциалом изменяет время когерентности квантового кубита [3].

Чтобы избежать таких эффектов, было предложено использовать для локализации атомов импульсное лазерное излучение с фемтосекундной длительностью импульса [4, 5]. В этом случае временной интервал, в течение которого атом находится в лазерном поле, составляет всего 10^{-7}–10^{-8} от полного времени локализации. К настоящему моменту времени использование импульсного излучения для дипольного захвата нейтральных атомов было реализовано только с импульсами длительностью более 1 пс [6].

В нашей работе мы впервые реализовали атомную дипольную ловушку с использованием фемтосекундного лазерного излучения (около 100 фс). Было показано, что основным каналом потерь атомов, локализованных в ловушке, является процесс нагрева, вызванного импульсной диффузией, в следствие взаимодействия атомов с высокими пиковыми интенсивностями импульсного излучения. Реализация такой дипольной ловушки возможна только при низкой средней мощности импульсного лазера. Наши экспериментальные исследования согласуются с теоретическими расчетами и показывают, что увеличение средней мощности лазера приводит к уменьшению времени жизни локализованных атомов.

Работа выполнена при финансовой поддерже гранта РФФИ №18-02-00429.

Литература

1. *Grimm R., Weidemuller M. and Ovchinnikov Y.B.* Optical dipole traps for neutral atoms // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 2000. V. 42. P. 95.
2. *Metcalf H.J. and Van der Straten P.* Laser cooling and trapping // Springer. New York. 1999.
3. *Kuhr S.* [*et al.*]. Analysis of dephasing mechanisms in a standing-wave dipole trap // Phys. Rev. A. 2003. V. 72. P. 023406.
4. *Balykin V.I.* Of an Atom under the Effect of Femtosecond Laser Pulses: From Chaos to patial Localisation // JETP Letters. 2005. V. 81. P. 209.
5. *Yanyshev D.N., Balykin V.I., Vladimirova Y.V., and Zadkov V.N.* Dynamics of atoms in a femtosecond optical dipole trap // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 033411.
6. *Clarke R.B.M., Graf T., Riis E.* Dipole traps with mode-locked lasers // Appl. Phys. B. 2000. V. 70. P. 695-700.

УДК 538.958, 535.374

Эффект Парселла в металлоорганической нано-патч антенне с излучателем в виде Ru-комплекса

***А.В. Грициенко*[1], *С.П. Елисеев*[1,2]**

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

Оптические антенны – это устройства, преобразующие свободно распространяющееся оптическое излучение в локализованную энергию и наоборот. Они дают возможность контролировать и обработавать оптические поля в нанометровом масштабе и представляются

перспективными для повышения производительности и эффективности фотодетектирования, светового излучения и зондирования [1].

В настоящей работе исследовались плазмонные нано-патч антенны (plasmonic nanopatch antennas, NPA/НПА). На рис. 1a, b представлены трехмерные модели гексагональной и пентагональной НПА с рутениевым комплексом в качестве излучателя. Данные наноантенны были исследованы на конфокальном флуоресцентном микроскопе Microtime 200.

В работе экспериментально показано значительное (до 7 нс) сокращение времени жизни возбужденных состояний Ru-красителя (с временем затухания ~ 800 нс), помещенного в неоднородную систему «алюминий – серебряная наночастица» (НПА), а также увеличение интенсивности фотолюминесценции эмиттера до трех раз. Данный эффект увеличения скорости спонтанного излучения вещества объясняется эффектом Парселла. Этот эффект описывается коэффициентом Парселла [2]:

$$F_p = \frac{\gamma_{sp}}{\gamma_{sp}^0},$$

где γ_{sp} – скорость спонтанного излучения эмиттера в среде (в резонаторе) и γ_{sp}^0 – скорость спонтанного испускания эмиттера в свободном пространстве.

Коэффициент Парселла для излучателя в резонаторе с пентагональными нанородами (рис. 1b) и с гексагональными серебряными нанопризмами (рис. 1a) составил значение 100 и 120 соответственно. Данное уменьшение времени затухания спонтанного излучения в конфигурации нано-патч антенны связано с увеличением локальной плотности фотонных состояний в плазмонном резонаторе, что приводит к увеличению вероятности спонтанного перехода из возбужденного состояния эмиттера.

Полученные результаты по укорочению времени спонтанной эмиссии и увеличению интенсивности излучения эмиттера в нано-патч антенне показывают возможные перспективы применения квантовых точек и отдельных молекул с более короткими временами люминесценции в нано-патч антеннах. Подобные нано-патч антенны могут лечь в основу для создания малогабаритных (~10 нм) и быстродействующих (~ 1 ТГц) оптических устройств [3]. Также НПА с рутениевым комплексом представляет интерес для фотовольтаических приложений в солнечных батареях и люминесцентных солнечных концетраторах (luminescent solar concentrator, LSC) [4].

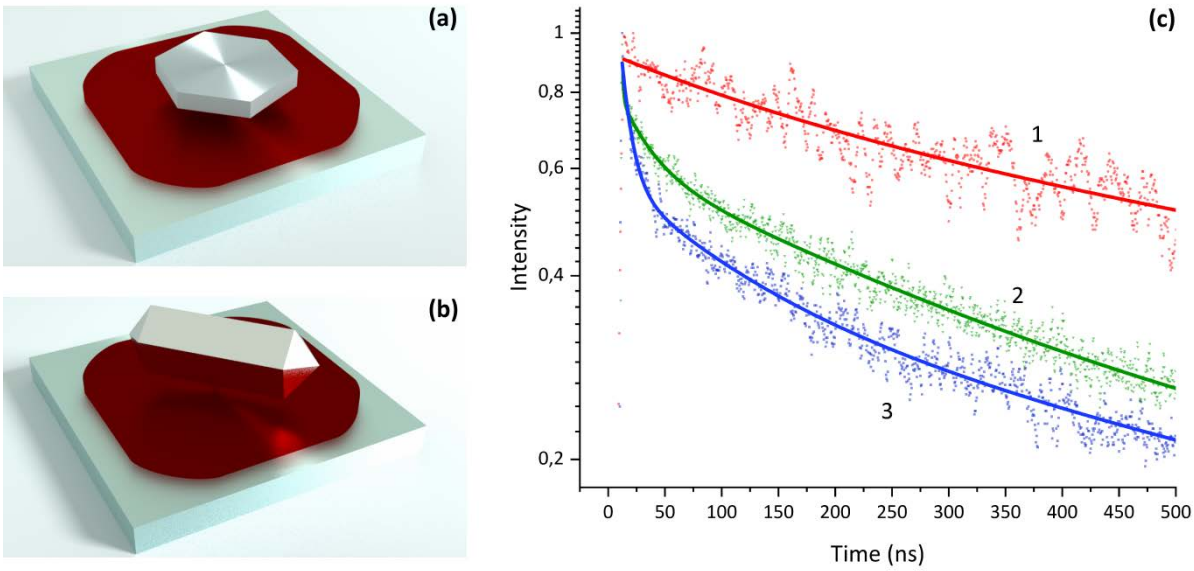


Рис. 1. Трехмерная модель НПА: (a) с гексагональным нанопризмой и (b) с пентагональным нанородом. Кинетические кривые затухания люминесценции Ru-комплекса в разных условиях: 1 – на алюминиевой подложке, 2 – в НПА с пентагональным нанородом, 3 – в НПА с гексагональной призмой

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 18-02-00811 и 16-29-11805. Выполнению технологической части работы способствовал грант РНФ 15-19-00205.

Литература

1. *Krasnok A.E.* [*et al.*]. Optical nanoantennas //Physics-Uspekhi. 2013. V. 56. N. 6. P. 539.
2. *Giannini V.* [*et al.*]. Plasmonic nanoantennas: fundamentals and their use in controlling the radiative properties of nanoemitters //Chemical reviews. 2011. V. 111. N 6. P. 3888-3912.
3. *Eliseev S.P.* [*et al.*]. Purcell effect in triangular plasmonic nanopatch antennas with three-layer colloidal quantum dots // JETP Letters. 2017. V. 105. N 9. P. 577-581.
4. *Kim J.Y.* [*et al.*]. A ruthenium complex as a single-component redox shuttle for electrochemical photovoltaics // Chemical Communications. 2015. V. 51. N 36. P. 7745-7748.

УДК 537.876.4

Квантовая электронная плазма и взаимодействие *H*-волн с одномерным металло-диэлектрическим фотонным кристаллом

Н.В. Зверев, А.А. Юшканов

Московский государственный областной университет

В работе численно изучено влияние кинетических и квантовых волновых свойств электронной плазмы на взаимодействие электромагнитных H-волн с одномерным металло-диэлектрическим фотонным кристаллом. Такие исследования в настоящее время представляют большой интерес в связи с бурным развитием физики нанотехнологий и оптоэлектроники.

Одномерный металло-диэлектрический фотонный кристалл состоит из N одинаковых плоских параллельных слоев металла толщиной d_1, между которыми находятся N–1 одинаковых слоев прозрачного диэлектрика с диэлектрической проницаемостью ε_2 толщиной d_2. Данный фотонный кристалл находится между двумя прозрачными средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_3.

Пусть H-волна (вектор **H** лежит в плоскости падения) падает на поверхность одномерного металло-диэлектрического фотонного кристалла под углом θ со стороны среды с ε_1. Тогда оптические коэффициенты отражения R, прохождения T и поглощения A электромагнитного излучения для рассматриваемого фотонного кристалла имеют вид [1–3]:

$$R=\left|\frac{m_{21}}{m_{22}}\right|^2, \qquad T=\mathrm{Re}\left(\frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_1}}\right)\cdot\left|m_{11}-\frac{m_{12}m_{21}}{m_{22}}\right|^2, \qquad A=1-R-T. \tag{1}$$

Здесь m_{jk} – матричные элементы матрицы перехода излучения для данного фотонного кристалла:

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}=\mathbf{M}_{3\,out}^{-1}\left(\mathbf{M}_{2\,in}\mathbf{M}_{2\,pr}\mathbf{M}_{2\,out}^{-1}\right)^{N-1}\mathbf{M}_{1\,in}, \tag{2}$$

где матрицы:

$$\mathbf{M}_{\alpha\,in}=\begin{pmatrix} 1+Z_H^{(1)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha & 1-Z_H^{(1)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha \\ -1-Z_H^{(2)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha & -1+Z_H^{(2)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$\mathbf{M}_{\alpha\,out}=\begin{pmatrix} 1-Z_H^{(1)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha & 1+Z_H^{(1)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha \\ 1-Z_H^{(2)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha & 1+Z_H^{(2)}\sqrt{\varepsilon_\alpha}\cos\theta_\alpha \end{pmatrix}, \tag{4}$$

$$\mathbf{M}_{2\,pr}=\begin{pmatrix} \exp(\mathrm{i}k_{2z}d_2) & 0 \\ 0 & \exp(-\mathrm{i}k_{2z}d_2) \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Далее, $\theta_1=\theta$, а θ_2 и $\theta_3=\theta'$ – углы преломления излучения соответственно в слои с ε_2 и в среду с ε_3. И, наконец, $Z_H^{(j)}$ (j = 1, 2) – импедансы H-волны на поверхности плоского слоя металла, вычисленные в работе [4] для случая зеркального отражения электронов от поверхностей слоя:

$$Z_H^{(j)}=\frac{2c\omega}{\mathrm{i}\,d_1}\sum_n\frac{1}{\omega^2\varepsilon_{tr}(\omega,k_n)-(ck_n)^2}. \tag{6}$$

Здесь ω – частота излучения, c – скорость света, $\varepsilon_{tr}(\omega,k)$ – поперечная диэлектрическая проницаемость электронной плазмы. Суммирование выполняется по всем нечетным n = ±1, ±3, ±5, … при j = 1 и по всем четным n = 0, ±2, ±4, … при j = 2. Входящие в (5) и (6) величины:

$$k_n = \sqrt{\left(\frac{\pi n}{d_1}\right)^2 + k_x^2}, \qquad k_x = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_1}\sin\theta, \qquad k_{2z} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_2}\cos\theta_2. \tag{7}$$

Для исследований взята поперечная проницаемость $\varepsilon_{tr}^{(qu)}(\omega,k)$ квантовой вырожденной электронной плазмы при нулевой температуре с постоянной частотой столкновений, полученная в работе [5]. В этой проницаемости учитываются как кинетические, так и квантовые волновые свойства электронной плазмы. Найденные результаты сравниваются с данными, полученными для проницаемости $\varepsilon_{tr}^{(DL)}(\omega)$ классического электронного газа в подходе Друде–Лоренца [4] без учета кинетических и квантовых волновых свойств электронов. Следует отметить, что $\varepsilon_{tr}^{(qu)}(\omega,k)$ в пределе $k \to 0$ переходит в $\varepsilon_{tr}^{(DL)}(\omega)$.

При расчетах используются следующие параметры: ω_p – плазменная частота электронной плазмы, τ – время релаксации электронов вследствие их столкновений в плазме, m_e – эффективная масса электронов проводимости, υ_F – скорость ферми-электронов вырожденной плазмы. В качестве металла фотонного кристалла выбран калий с параметрами $\omega_p = 6.61 \cdot 10^{15}$ с$^{-1}$, $\tau = 1.5 \cdot 10^{-13}$ с, $m_e = 9 \cdot 10^{-31}$ кг и $\upsilon_F = 8.5 \cdot 10^5$ м/с. В качестве вещества диэлектрика прозрачных слоев фотонного кристалла выбран кварц с $\varepsilon_2 = 2$. А диэлектрическими средами, окружающими фотонный кристалл, являются воздух и кварц ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_3 = 2$ или $\varepsilon_1 = 2$, $\varepsilon_3 = 1$).

Численные расчёты коэффициентов R, T и A по формулам (1) – (7) показывают, что результаты для квантовой вырожденной плазмы отличаются от данных для классического электронного газа в частотной области с резким поведением оптических коэффициентов (Рис.1). Это справедливо при числе слоев металла $N \geq 5$ и при толщинах металлического и диэлектрического слоев $d_1 \sim c/\omega_p$ и $d_2 \sim (4 \text{ — } 100)d_1$. Фотонный кристалл позволяет более четко увидеть данное отличие [3] (см. рис. 1). При этих условиях отличие квантовой невырожденной плазмы от классического электронного газа наблюдается и для частот $\omega \sim \pi\upsilon_F / d_1$, что обусловлено периодическим движением электронов между границами металлического слоя [4]. Тем самым показано влияние кинетических и квантовых волновых свойств электронной плазмы на взаимодействие H-волн с одномерным металло-диэлектрическим фотонным кристаллом.

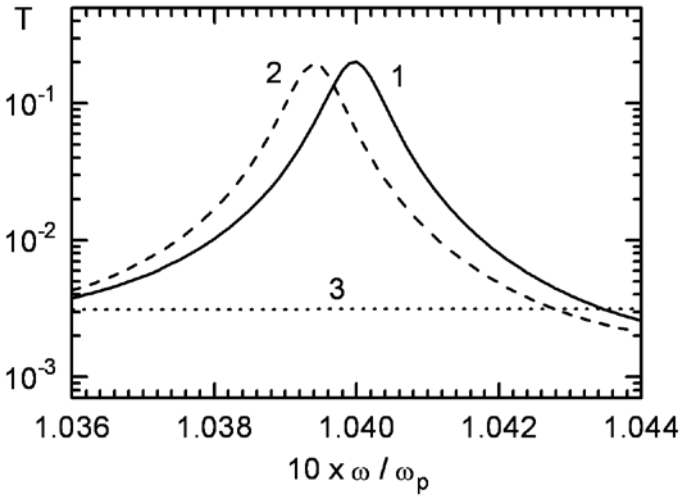


Рис. 1. Зависимость коэффициента прохождения T от частоты ω: 1, 3 – квантовая вырожденная электронная плазма; 2, 3 – классический электронный газ. 1, 2 – $N = 5$; 3 – $N = 1$. Величины $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 2$, $\theta = 75°$, $\omega_p = 6.61 \cdot 10^{15}$ с$^{-1}$, $d_1 = 64$ нм, $d_2 = 2.56$ мкм.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № *17-47-500752 р_а*.

Литература

1. *Горелик В.С., Капаев В.В.* Усиление электромагнитного поля в ограниченных одномерных фотонных кристаллах // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. Вып. 3 (9). С. 435.
2. *Yeh P.* Optical waves in layered media. NY: Wiley, 1988. 406 p.
3. *Зверев Н.В., Юшканов А.А.* Квантовая электронная плазма в одномерном металло-диэлектрическом фотонном кристалле // Оптика и спектроскопия. 2017. Т. 122. № 2. С. 222.
4. *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.
5. *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.

УДК 538.958

Два типа изолированных (квантовых) излучателей, связанных с дислокациями в твёрдом растворе CdZnTe

***В.С. Кривобок*[1], *С.Н. Николаев*[1], *С.И. Ченцов*[1], *Е.Е. Онищенко*[1], *А.А. Пручкина*[1], *В.С. Багаев*[1], *А.А. Силина*[2], *Н.А. Смирнова*[2]**

[1]Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН
[2] Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет»

В данной работе на основе измерений низкотемпературной (5K) микрофотолюминесценции (МФЛ) с разрешением по поляризации реализован подход, который позволил экспериментально измерить спектр и оценить анизотропию одиночных излучателей, сформированных с участием дислокаций в кристаллическом $Cd_{0.95}Zn_{0.05}Te$. Наиболее интересные результаты были получены при исследовании более дефектных областей кристалла, содержащих микродвойники. Примеры сигнала МФЛ при 5 К, демонстрирующие наличие поляризованных (одиночных) излучателей иллюстрирует рис. 1.

Одиночные излучатели были разделены на две группы, которые отличаются не только спектральным положением линии излучения, но и характером спектральных биений сигнала люминесценции. Для излучателей первого типа спектральное положение бесфононной линии излучения (БФЛ) соответствует обычному дислокационному излучению $Cd_{0.95}Zn_{0.05}Te$, при этом положение и интенсивность БФЛ практически не меняются с течением времени. Для излучателей второго типа БФЛ расположена на 30–50 мэВ выше обычного дислокационного излучения и подвержена гигантским (~ 10 мэВ) флуктуациям спектрального положения и интенсивности. Для каждого из двух типов излучателей связь с решеткой $Cd_{0.95}Zn_{0.05}Te$ подтверждается наличием фононных (LO) повторений характерных для данного материала. Заметная степень линейной поляризации в плоскости, содержащей направление [1 1 0], которое соответствует направлению распространения полных или частичных дислокаций, указывает на сильно анизотропный характер соответствующих электронных состояний и подтверждает их связь с дислокациями.

Сходства и различия двух обнаруженных типов излучателей объяснены на основе представлений о разных типах экситонных состояний, сформированных с участием ядра дислокаций, распространяющихся вдоль направления [1 1 0].

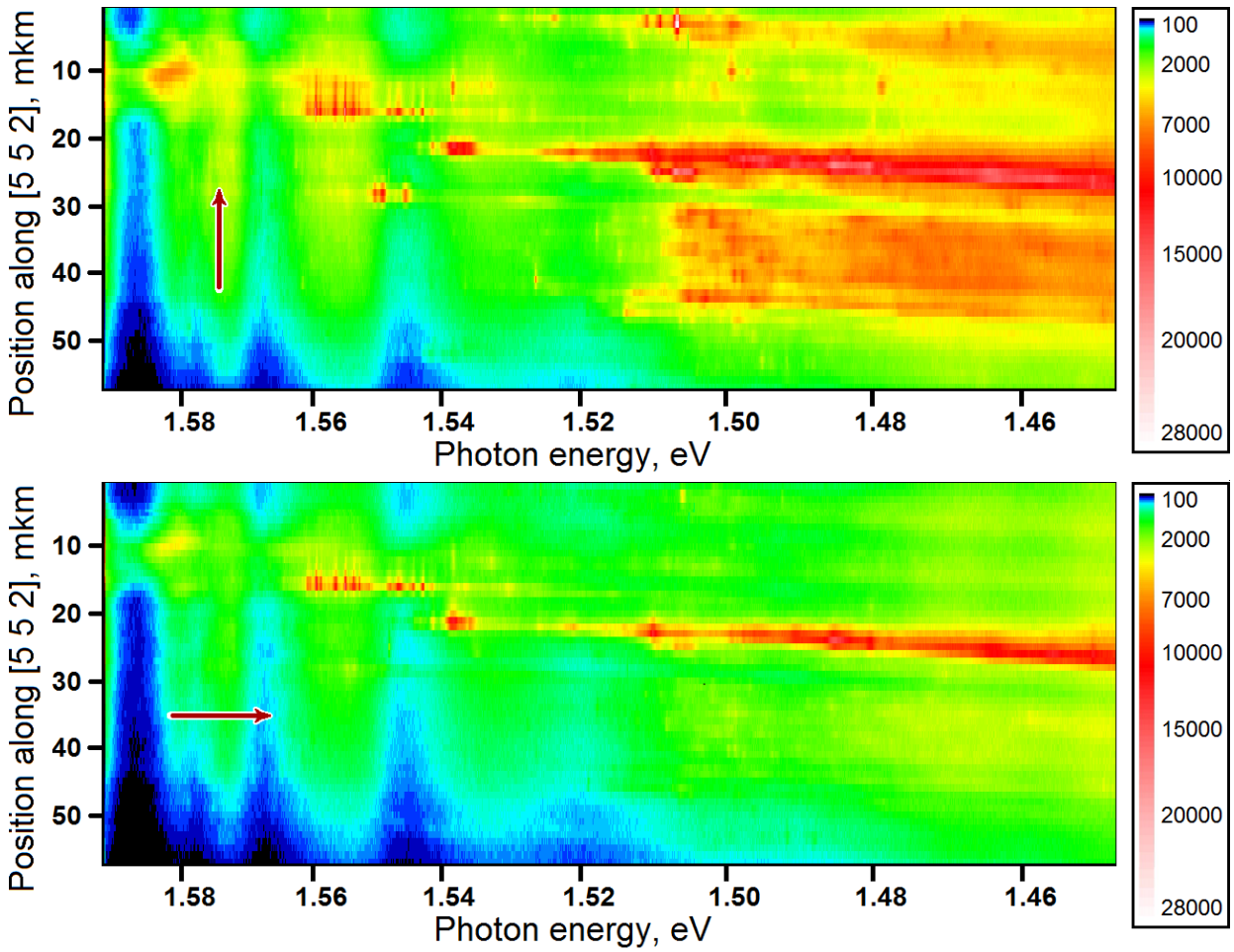


Рис. 1. Структура сигнала МФЛ в режиме пропускания линейной поляризации, содержащей направление [552] (сверху) и направление [1 –1 0] (снизу). Изменение пропускания реализовано за счет вращения поляризатора вокруг направления [1 1 –5]. Рисунки представляют собой карты интенсивности МФЛ, где по оси абсцисс отложено спектральное положение, а по оси ординат – пространственное. Таким образом, «строке» на карте соответствует спектр МФЛ из области размером ~1 мкм

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 17-72-10265.

Литература

1. *Krivobok V.S., Nikolaev S.N., Chentsov S.I., Onishchenko E.E., Pruchkina A.A., Bagaev V.S., Silina A.A., Smirnova N.A.* Two types of isolated (quantum) emitters related to dislocations in crystalline CdZnTe // Journal of Luminescence 2018. V. 200. P. 240.

УДК 538.958

Люминесцентные свойства оптически активных центров в кристаллическом ZnSe:Fe при низких температурах

***А.А. Гладилин*[1], *В.П. Калинушкин*[1] *В.С. Кривобок*[2], *С.И. Ченцов*[2]**

[1]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Традиционно средний инфракрасный диапазон излучения представляет большой интерес для фундаментальных исследований и прикладных работ. В последние годы кристаллы селенида цинка, легированные железом и хромом, являются основными кандидатами для создания лазеров в ИК-диапазоне: ZnSe:Fe – 3–5 мкм, ZnSe:Cr – 2–3 мкм. Наилучшие на сегодняшний день лазерные характеристики были получены при оптической накачке в полосу поглощения железа [1]. В то же время использование оптической накачки затрудняет создание малогабаритных лазерных приборов, работающих в ИК-диапазоне. Другим источником накачки может служить ударная ионизация высокоэнергетическими «горячими» электронами. Для использования данной технологии необходима информация о структуре кристалла и распределении дефектов, влияющих на оптические характеристики. Систематические данные, описывающие поведение примесей и собственных точечных дефектов в сильнолегированных кристаллах A2B6, в литературе отсутствуют.

Данная работа направлена на изучение объемного распределения дефектов, формирующих оптически активные центры, в кристаллах селенида цинка, легированного железом. Основное внимание в работе уделяется низкотемпературным (5 К) измерениям, при которых, с одной стороны, заметно выше квантовый выход люминесценции, с другой стороны, заметно меньше наложение линий излучения, связанных с различными дефектами. Для легирования образцов использовалось два подхода. При первом (легирование «из центра») на две пластины ZnSe наносились тонкие плёнки железа, после чего пластины соединялись плёнками вовнутрь и отжигались. При втором (легирование «с краёв»), пластины соединялись таким образом, чтобы плёнки железа находились по краям полученной структуры и также производился отжиг. Соответственно, в измерениях использовались два типа полученных образца ZnSe:Fe с легированием «с краёв» и с легированием «из центра». При анализе спектров фотолюминесценции (ФЛ) было обнаружено, что профиль интенсивности линий в спектрах ФЛ для образцов, легированного «из центра», так же, как и для образца, легированного «с краёв», в основном антикоррелирует с профилем легирования железа определенным на основе данных о поглощении излучения на длине волны 2,8 мкм. Для этого использовался ИК-микроскоп HYPERION 2000 в комбинации с ИК-фурье спектрометром Tenzor-27 (Bruker).

Рис. 1 иллюстрирует пример спектра излучения ZnSe:Fe, с легированием «из центра», записанного при температуре 5 К в условиях оптического возбуждения выше края фундаментального поглощения. В спектре регистрируется пять полос высокой интенсивности со спектральным положением в районе 2,543 эВ, 2,389 эВ, 1,860 эВ, 1,528 эВ и 1,307 эВ соответственно. Данные пять линий также наблюдались в низкотемпературных спектрах ФЛ для образца ZnSe:Fe, легированного «с краёв». Отметим, что в спектрах ФЛ чистого ZnSe данные полосы отсутствуют. Это указывает на то, что центры дефектного излучения, ответственные за эти линии, возникают вследствие легирования образца железом.

На рис. 2. показаны профили интенсивности ФЛ соответствующие линиям излучения ФЛ на рис. 1. Как видно из сравнения с профилем легирования железом (справа внизу на рис. 2.), люминесценция наиболее интенсивна для областей, соответствующих краям профиля легирования. Таким образом, было показано что люминесцентные центры, связанные с вышеуказанными линиями излучения, являются сопутствующими дефектами, возникающими на краях профиля легирования селенида цинка железом.

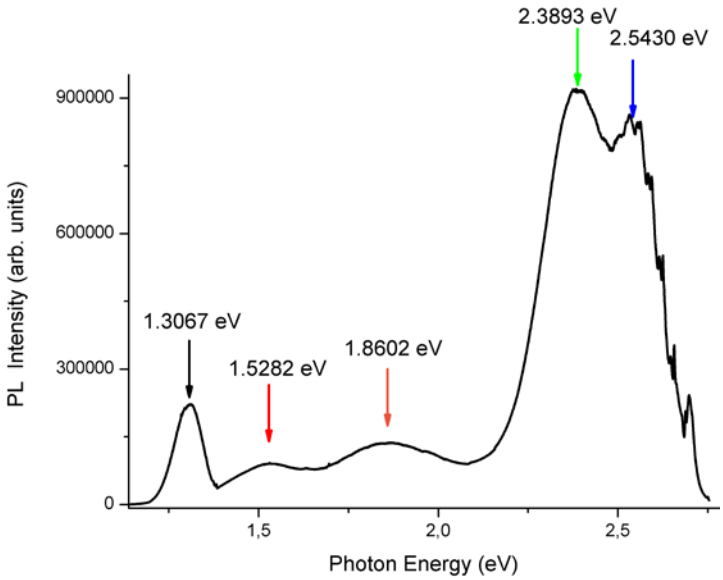


Рис. 1. Интегральный спектр ФЛ для образца, легированного из центра

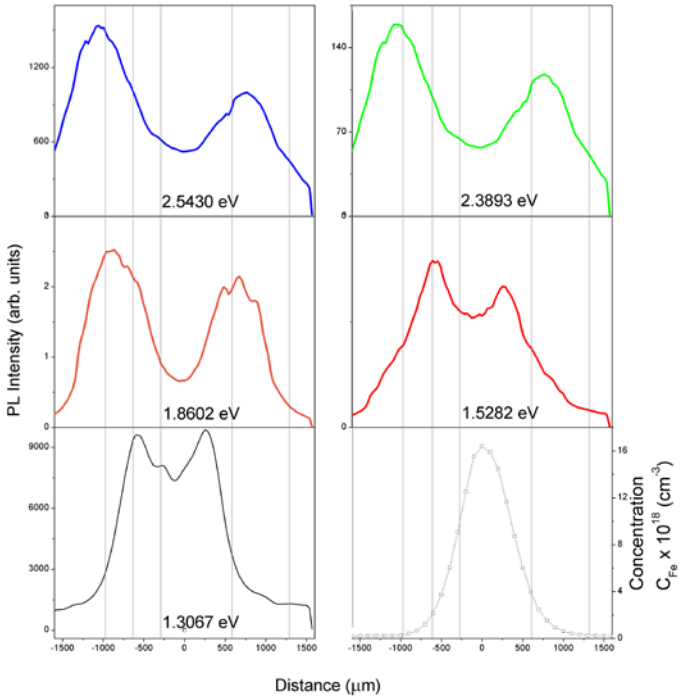


Рис. 2. Сравнение профиля легирования (справа внизу) с профилями спектров ФЛ для образцов, легированных из центра

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00113.

Литература

1. *Dormidonov A.E., Firsov K.N., Gavrishchuk E.M., Ikonnikov V.B., Kazantsev S.Yu., Kononov I.G., Kotereva T.V, Savin, Timofeeva N.A.* High-efficiency room-temperature ZnSe:Fe2+ laser with a high pulsed radiation energy // Applied Physics B. Lasers and Optics. 2016. V. 122. N 8.

УДК 539.184.2

Оптические свойства SiV центров в ультрамаленьких наноалмазах

***А.И. Зеленеев*[1,2], *С.В. Большедворский*[1,3,4], *В.В. Сошенко*[3,4], *О.Р. Рубинас*[1,2,4], *Л.А. Жуликов*[1], *В.Н. Сорокин*[2,3], *А.В. Акимов*[2,3,5]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Russian Quantum Center
[3]Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН
[4]Spin Sensor Technologies
[5]Texas A&M University

Ультрамаленькие наноалмазы привлекают много внимания среди исследователей, поскольку однофотонные источники являются ключевым элементом обработки квантовой информации. Широкое применение нашли NV(Nitrogen-Vacancy) центры окраски в алмазе благодаря чувствительности к электромагнитным полям и температуре, а также возможности излучать одиночные фотоны даже при комнатной температуре. Однако из-за низкого фактора Дебая–Валлера квантовая эффективность однофотонного источника на NV центре оказывается порядка нескольких процентов. Поэтому одно из направлений исследований в настоящее время – это работы по поиску оптически активных центров, обладающих узкой спектральной линией и доступом к электронному спину [1]. Помимо однофотонных приложений ультрамаленькие наноалмазы, содержащие центры окраски, представляют большой интерес для биологических приложений [2, 3].

В данной работе мы исследуем оптические свойства SiV(Silicon-Vacancy) – центров окраски в алмазе, содержащихся в ультрамаленьких наноалмазах. Данные наноалмазы получены HPHT методом безметального роста на основе смеси углеводорода и кремнийорганических соединений. Средний размер наноалмазов составлет 7–8 нм (рис. 1а), несмотря на маленький размер наноалмазы все же могут содержать одиночные SiV-центры. Для доказательства одиночности центров окраски, была измерена корреляционная функция второго порядка (рис. 1б).

Важное преимущество SiV-центра состоит в том, что до 70% эмиссии содержится в бесфононной линии, с шириной порядка 5 нм при комнатной температуре [4]. Необходимо также отметить, что данное излучение SiV-центра приходится на 738 нм, где фоновая флуоресценция окружающего материала мала. Оптические свойства наших наноалмазов совпадают с предсказанными. Благодаря высокому качеству наноазмазов в них практически отсутствует упругое напряжение, что приводит к низкому разбросу положения бесфононной линии порядка 1 нм и ширине порядка 6 нм (рис. 2а,б). Таким образом, данные искусственные ультрамаленькие наноалмазы с низким уровнем внутреннего напряжения обладают большим потенциалом для биомедицинских приложений и обработки квантовой информации.

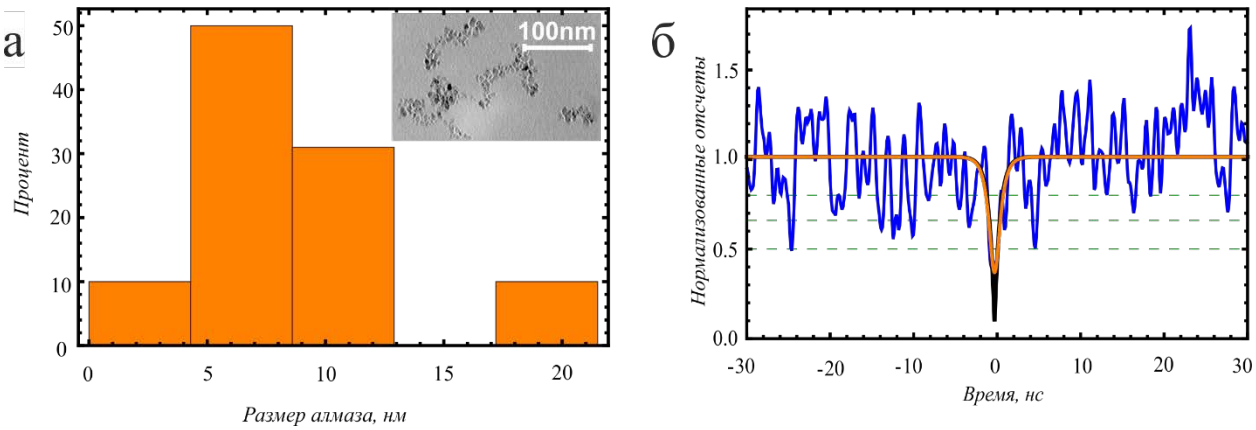


Рис.1. а – гистограмма распределения размеров наноалмазов, полученная из измерений ПЭМ; б – автокорреляционная функция g2, полученная от одиночного SiV-центра.

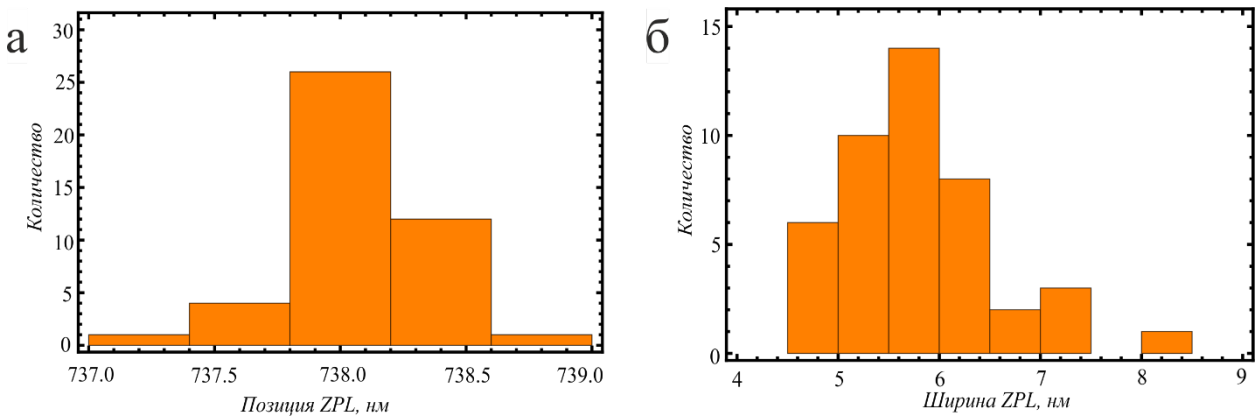


Рис.2. а – Гистограмма положения бесфононной линии; б – Гистограмма распределения ширины на полувысоте для бесфононной линии.

Литература

1. *Jelezko F.*, [*et. al.*]. Single defect centres in diamond: A review // Phys. status solidi. 2016. V. 3225. P. 3207–3225.
2. *Schirhal R.*, [*et. al*]. Nitrogen-vacancy centers in diamond: nanoscale sensors for physics and biology // Annu. Rev. Phys. Chem. 2013. V. 65 P. 83–105.
3. *Fedotov I.V.*, [*et. al.*]. Fiber-optic control and thermometry of single-cell thermosensation logic // Sci. Rep 2015. V. 5. 15737.
4. *Wang C.*, [*et. al.*]. Single photon emission from SiV centres in diamond produced by ion implantation // J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys. 2006. V. 39 P. 37–41.

УДК 535.14; 535.373

Свойства запутанных квантовых состояний систем одинаковых атомов в магнитных полях

А.И. Мохов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрены системы из трёх одинаковых атомов, которые были однократно возбуждены и помещены в магнитное поле. Одна из систем «Струна» представляет собой три атома, помещённые на одинаковом расстоянии между друг другом, к которой приложено магнитное поле под углом $\arccos((1/3)^{0.5})$, а другая – равнобедренный «Треугольник» с углом $\arccos((1/3)^{0.5})$ при основании и магнитным полем, приложенным перпендикулярно длинной стороне. Возбужденные атомы приобретают угловой момент.

Для запутанных состояний были построены графики энергий, получаемые из решения уравнений Шрёдингера [1]. На этих же графиках были обнаружены пересечения уровней разных состояний, для которых было предложено использовать метод спектроскопии пересечения уровней (рис. 1).

Так как в обеих исследуемых системах возникали пересечения состояний, имеющих разную симметрию по перестановке крайних атомов, благодаря тому, что одно состояние симметричное, а другое – антисимметричное – возникает зависимость скорости спонтанного распада системы от расстояния между атомами, так как от расстояния между атомами зависит отношение вкладов симметричного и антисимметричного состояния, каждое из которых имеет свою зависимость скорости спонтанного распада от расстояния [2].

В результате получаются следующие графики зависимости флуоресценции в зависимости от времени для различных значений разницы Δ энергий двух состояний в единицах скорости распада одиночного атома (красный, зелёный, синий для $\Delta = -1,0,1$ соответственно) (рис. 2):

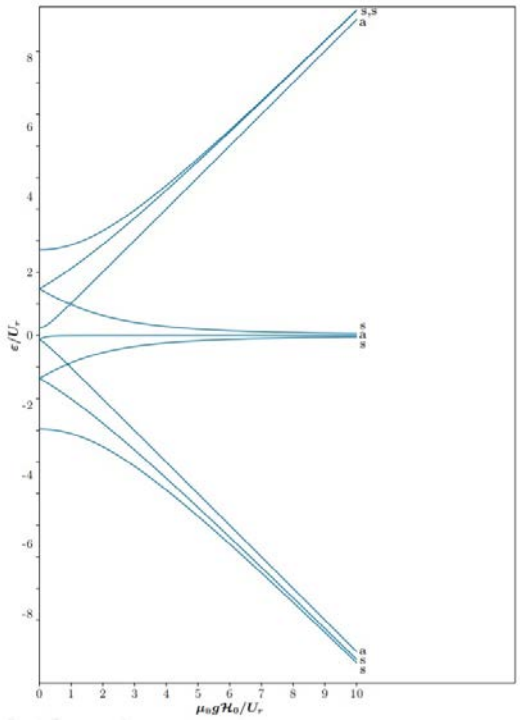


Рис. 1. Графики энергий для состояний «Струна»

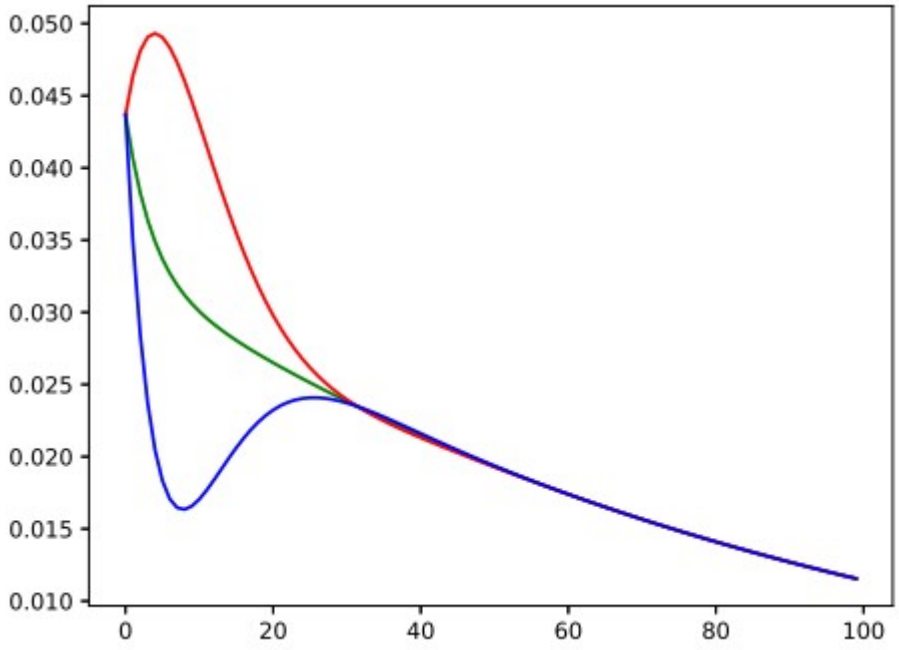


Рис. 2. Интенсивность флуоресценции в зависимости от времени

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.,* Квантовая механика, нерелятивистская теория, Теоретическая физика. Т. 3. М.: Физматгиз. 1963.
2. *Redchenko E.S., Makarov A.A., Yudson V.I.* Nanoscopy of pairs of atoms by fluorescence in a magnetic field // Phys. Rev. A. 97. 0438.

УДК 535.215.4

Структура и электрооптические свойства монокристаллов $CH_3NH_3PbI_3$

В.Е. Аникеева[1,3], ***О.И. Семёнова***[2], ***К.Н. Болдырев***[3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Институт физики полупроводников СО РАН
[3]Институт спектроскопии РАН

Исследования нового фотоактивного материала – метиламмония трийодид свинца ($CH_3NH_3PbI_3$) с кристаллической структурой перовскита – были названы прорывом 2013 года в физике по версии журнала Science. Достигнутый КПД тонкоплёночных солнечных элементов (СЭ) на основе перовскита $CH_3NH_3PbI_3$ к 2017 году составляет 22,1 % [1], что позволяет данному материалу конкурировать с СЭ на кремниевых подложках. Кроме того, применение подложек на основе полупроводникового перовскита позволяет отказаться от дорогостоящих подложек на основе кремния. Ряд таких физических свойств, как оптимальная ширина запрещённой зоны (1,55 эВ), коэффициент поглощения видимого излучения (10^5 $см^{-1}$), высокое значение диффузионной длины (175 мкм), позволяет использовать метиламмония трийодид свинца не только в СЭ, но и в светодиодах, лазерах и детекторах рентген- и гамма-лучей [2,3].

В работе были синтезированы монокристаллы перовскита $CH_3NH_3PbI_3$ из насыщенного раствора с понижением температуры (Рис.1). Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) подтверждена стехиометрия соединения $CH_3NH_3PbI_3$, все основные элементы (углерод, азот, свинец и йод) представлены на РФЭС-спектре.

Получена картина дифракции быстрых электронов на отражение (RHEED), демонстрирующая структурное совершенство поверхности синтезированных монокристаллов перовскита. Пространственная группа (I4/mcm) и параметры решётки (a = 8,8776(7) Å, b = 8,8776(7) Å, c = 12,6702(8) Å, V = 998,56(17) $Å^3$) синтезированных монокристаллов были определены при помощи метода дифракции рентгеновских лучей при комнатной температуре. Таким образом, анализ полученных кристаллографических характеристик позволяет сделать вывод о том, что синтезированный $CH_3NH_3PbI_3$ находится в тетрагональной фазе, что соответствует данным CCDC, приведённым в [4].

Оптоэлектронные свойства были исследованы в широком температурном диапазоне в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) и спектрах фототока. Фазовый переход от орторомбической к тетрагональной фазе при температурах от 140–160 К наблюдается в спектрах фототока (рис. 2а). В спектре фототока при температуре 85 К наблюдается экситонный пик при 1,63 эВ, что может свидетельствовать о структурном совершенстве кристаллов. Спектральные измерения фототока при температурах ниже 130 К показали, что перовскит, находясь в орторомбической фазе, имеет порог поглощения около 1,65 эВ. Трансформация спектра ФЛ при температурах 140–160 К соответствует структурному фазовому переходу от орторомбической к тетрагональной фазе (рис. 2б). Также наблюдались дополнительные сдвиги и изменение интенсивности ФЛ при температурах 100 К и 18 К, природа которых до конца не определена.

Также структурные фазовые переходы были исследованы методом рентгеновской дифракции в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (рис. 3).

Таким образом, в данной работе были получены монокристаллы перовскита методом прецизионного уменьшения температуры насыщенного раствора и проведены его электрооптические исследования. Структурные фазовые переходы в $CH_3NH_3PbI_3$ проявляются при анализе спектральной зависимости фототока в температурном интервале от 85 К до 300 К и спектров ФЛ при температурах от 5 К до 330 К. На настоящий момент обсуждаются дополнительные аномалии в спектре фотолюминесценции при температурах 100 К и 18 К.



Рис. 1. Фото синтезированных монокристаллов $CH_3NH_3PbI_3$

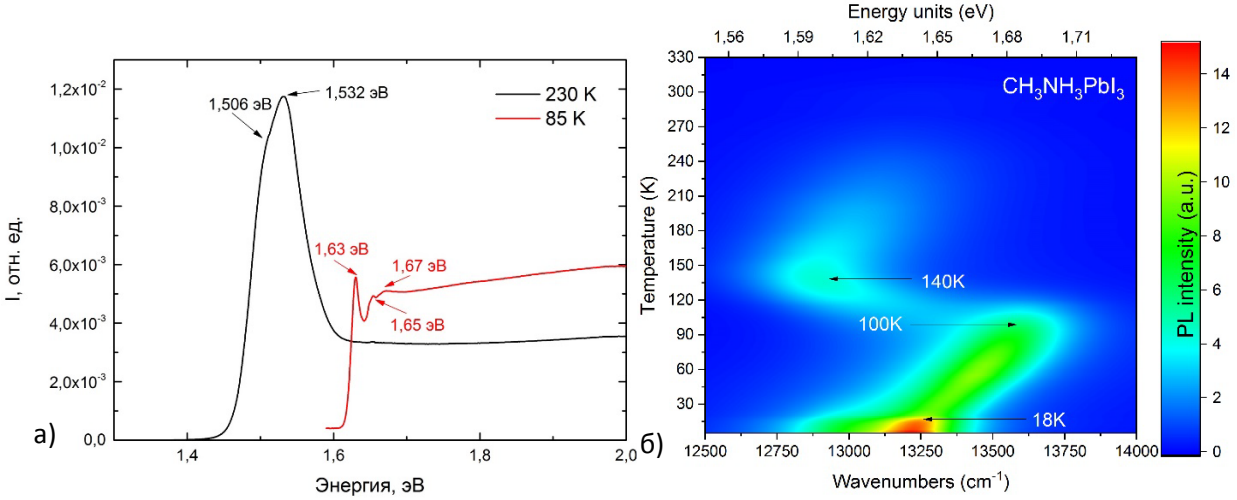


Рис. 2. а – Спектры фототока при температурах 85 К (орторомбическая фаза) и 230 К (тетрагональная фаза); б – Карта интенсивностей спектров ФЛ в температурном диапазоне 5 – 330 К

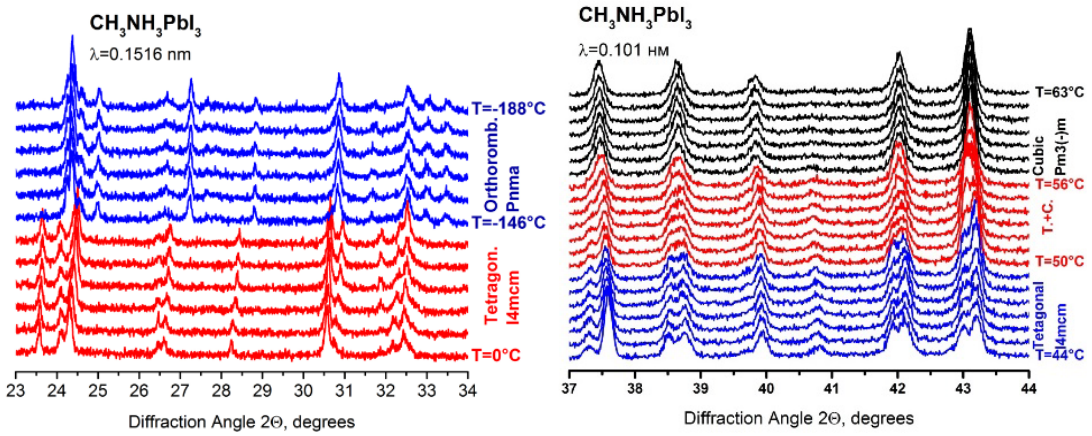


Рис.3. Картины рентгеновской дифракции для монокристаллов перовскита.

Литература

1. *Yang W.S.*, [*et al*]. Iodide management in formamidinium-lead-halide–based perovskite layers for efficient solar cells.recession of the polarization of particles moving in a homogeneous electromagnetic field // Science. 2017. V. 356. P. 1376.
2. *Xing G.*, [*et al*]. Low-temperature solution-processed wavelength-tunable perovskites for lasing // Nat. Mater. 2014. V. 13. P. 476.
3. *Yakunin S.*, [*et al*]. Detection of gamma photons using solution-grown single crystals of hybrid lead halide perovskites // Nature photonics. 2016. V. 10. P. 585.
4. *Allen F.H* The Cambridge Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising // Acta Crystallographica Section B. Structural Science. 2002. V. 58(3). P. 380.

УДК 538.958

Резонансная спектроскопия комбинационного рассеяния атомарно тонких слоёв MoS_2

С.Н. Николаев, В.С. Багаев, С.И. Ченцов

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Слоистые полупроводники, в особенности дихалькогениды переходных металлов (ДХПМ), являются объектом интенсивных исследований. Интерес к этим материалам определяется возможностью получения истинно двумерных полупроводниковых систем, а также их необычным свойствами. Так, зонная структура большинства ДХКП претерпевает существенные изменения при уменьшении толщины до одного монослоя. При этом энергия связи экситонов в таких материалах составляет сотни мэВ, что позволяет исследовать экситонный эффект в них при комнатной температуре. В данной работе исследовалось взаимодействие различных экситонных состояний в атомарно тонких слоях MoS_2 с фононами при помощи резонансного комбинационного рассеяния света (КРС).

Исследуемый образец был получен расщеплением объемного кристалла MoS_2 с последующим нанесением на подложку SiO_2/Si с толщиной оксидного слоя 300 нм. На рис. 1 приведен снимок образца в оптический микроскоп. Изменение цвета чешуйки определяется интерференцией в структуре, что позволило оценить толщину слоя MoS_2 в четыре монослоя [1]. Экситонные состояния прямого края собственного поглощения в таком слое должны лежать в области 1,9 эВ (A-экситон), 2,1 эВ (B-экситон) и 2,5 эВ (C-экситон) [2]. Для резонансного возбуждения A- и B-экситонов использовался He–Ne лазер с длиной волны 632,8 нм, а C-экситона – твердотельный лазер (Nd:YAG) с длиной волны 472 нм.

Анализ спектров КРС вблизи 400 $см^{-1}$ показал, что разница в спектральном положении линий $E^{(1)}_{2g}$и A_{1g} в точках 1 и 2 составила 24,3 ± 0,2 $см^{-1}$ и 25,0 ± 0,2 $см^{-1}$ соответственно [3], что подтверждает выводы о толщине слоя MoS_2, полученные по оптическим измерениям.

На рис. 2 представлены спектры резонансного КРС в более широком спектральном диапазоне. Видно, что общий вид спектра MoS_2 толщиной четыре монослоя практически полностью повторяет спектр объемного материала при одной длине волны возбуждения, превосходя его в интенсивности в 3–10 раз. В то же время, изменение длины волны лазера достаточно сильно меняет спектр комбинационного рассеяния. Можно отметить, что A- и B-экситоны существенно сильнее взаимодействуют с акустическими фононами LA и XA (TA или ZA), а относительная интенсивность линии E^2_{1u} выше на порядок. С другой стороны, при энергии кванта лазерного излучения 2,63 эВ в процессе комбинационного рассеяния участвует C-экситон, что приводит к более богатой структуре рамановских пиков, особенно в области 650–850 $см^{-1}$. Необычной особенностью этих спектров также является линия E_{1g}-фонона, который является рамановски неактивным.

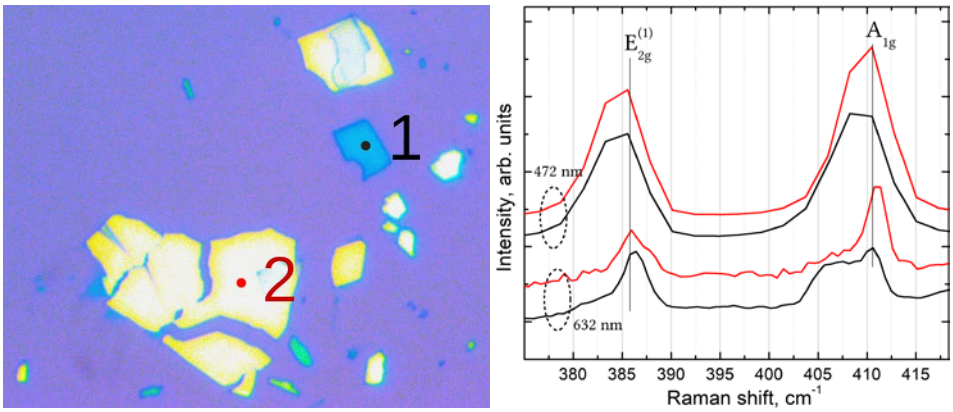


Рис. 1. a – оптическое изображение образца $MoS_2/SiO_2/Si$. Цифрами обозначены области, в которых проводилось измерение спектров комбинационного рассеяния: 1 — толщина MoS_2 4 монослоя, 2 — больше 20 монослоев. b – спектры комбинационного рассеяния в точках 1 (черные кривые) и 2 (красные кривые) вблизи линий $E^{(1)}_{2g}$и A_{1g}

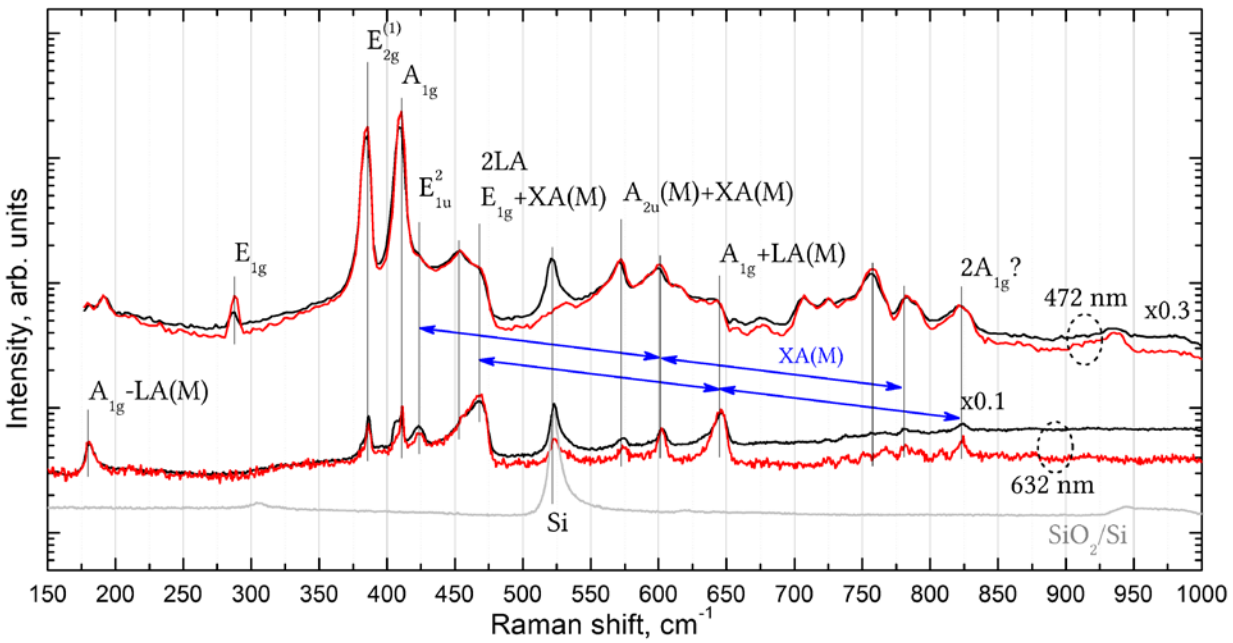


Рис. 2. Спектры резонансного комбинационного рассеяния MoS_2, полученные при возбуждении лазерами с длинами волн 632 нм и 472 нм. Черные линии соответствуют спектрам MoS_2 толщиной 4 монослоя (точка 1 на рис. 1), красные — объемному материалу (точка 2). Синими стрелками показаны XA фононные повторения связанные с испусканием TA или ZA фононов вблизи M точки зоны Бриллюэна

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 18-72-00235 и РФФИ в рамках научного проекта № 18-02-01129.

Литература

1. *Li H., Wu J., Huang X., Lu G., Yang J., Lu X., Xiong Q., Zhang H.,* Rapid and reliable thickness identification of two-dimensional nanosheets using optical microscopy. //ACS Nano. 2013. 7(11). 10344.
2. *Klots A.R., Newaz A.K.M., Wang B., Prasai D., Krzyzanowska H., Lin J., Caudel D., Ghimire N.J., Yan J., Ivanov B.L.,* [*et al.*]. Probing excitonic states in suspended two-dimensional semiconductors by photocurrent spectroscopy // Sci. Rep. 2014. 4.
3. *Lee C., Yan H., Brus L.E., Heinz T.F., Hone J., Ryu S.,* Anomalous lattice vibrations of single-and few-layer MoS 2 // ACS Nano. 2010. 4(5). 2695.

УДК 536.715

Высаждение наноалмазов методом вакуумного испарения

***Л.А. Жуликов*[1], *А.И. Зеленеев*[1,2], *С.В. Большедворский*[1,3,4], *В.В. Сошенко*[3,4], *О.Р. Рубинас*[1,2,4], *В.Н. Сорокин*[2,3], *А.В. Акимов*[2,3,5]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Russian Quantum Center
[3]Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН
[4]Spin Sensor Technologies
[5]Texas A&M University

Равномерное высаждение частиц на пластины имеет множество практических применений. В частности, равномерное высаждение наноалмазов позволяет обнаружить одиночные центры окраски в их кристаллических решётках. В свою очередь центры окраски имеют большое приложение в квантовой оптике и биологии [1]. Однако это является непростой задачей, и многие годы ученые находят различные методы для её решения. Главной проблемой равномерного высаждения является эффект кофейного пятна [2] и эффект Марангони [3]. Уже известны такие методы, позволяющие справляться с этими эффектами, как добавление эллипсоидных примесных наночастиц в раствор, которые подавляют внутренние капиллярные потоки, вызывающие эффект кофейного пятна [1,4]; а также использование жидкостей, обладающих определенными

физическими свойствами, в которых при данных внешних условиях возникает поток Марангони, противодействующий капиллярному течению [5].

В нашей работе мы представляем новый метод высаждения наноалмазов – испарение коллоидного раствора в вакуумной камере, а также исследуем распределение частиц на подложке после испарения.

В ходе работы были обнаружены три характерные зоны высаждения наноалмазов: внешняя – кофейное кольцо, центральная – след от ледяного пятна, появляющегося при испарении жидкости в вакуум, и средняя – кольцо в промежутке между зонами. Распределение частиц по подложке было исследовано с помощью атомного силового микроскопа (рис. 1а). Из измерений следует, что в средней зоне наночастицы высаждались равномерно. На краю капли виден результат эффекта кофейного пятна, а в центральной части, где кристаллизовался лед после испарения воды, – скопление наночастиц (рис. 1б).

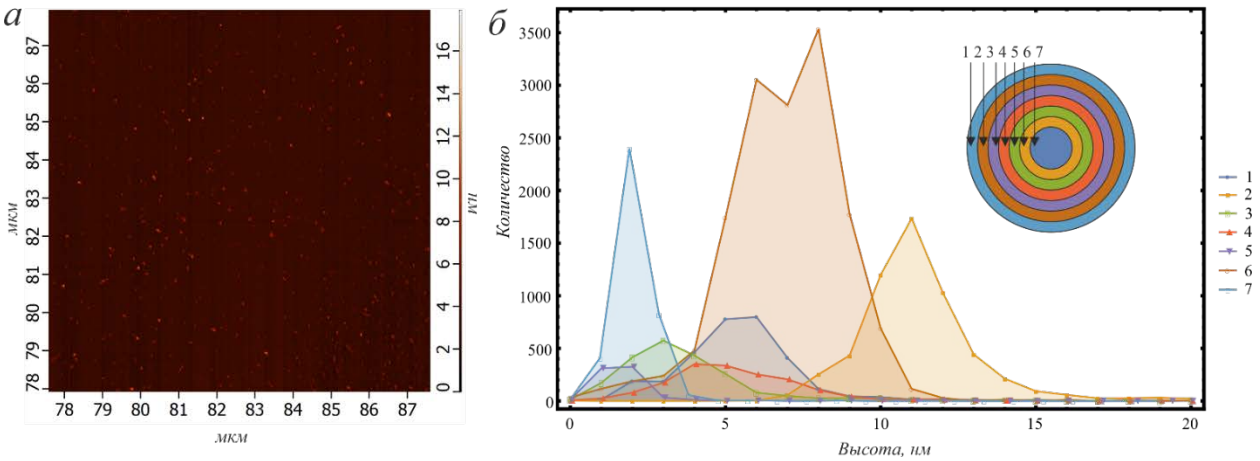


Рис. 1. а – АФМ-карта участка подложки; б – гистограмма распределения наноалмазов на подложке

Литература

1. *Yunker P.J., Still T., Lohr M.A., Yodh A.G.* Suppression of the coffee-ring effect by shape-dependent capillary interactions // Nature. 2011. V. 476. P. 308–311.
2. *Deegan R.D., Bakajin O., Dupont T.F., Huber G., Nagel S.R., Witten T.A.* Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops // Nature. 1997. V. 389. P. 827–829.
3. *Hu H. and Larson R.G.* Analysis of the Effects of Marangoni Stresses on the Microflow in an Evaporating Sessile Droplet // Langmuir. 2005. V. 21. P. 3972–3980.
4. *Xu, T.* [*et al.*]. Discrete Element Model for Suppression of Coffee-Ring Effect // Sci. Rep. V. 7, P. 1-10
5. *Hu H. and Larson R.G.* Marangoni Effect Reverses Coffee-Ring Depositions // J. Phys. Chem. B. 2006. V. 110. P. 7090–7094.

УДК 535-15

Люминесцентные свойства боратов $LnGa_3(BO_3)_4$ (*Ln* = Nd, Sm, Er, Dy, Ho)

***Н.Н. Кузьмин*[1,2], *К.Н. Болдырев*[2]**

[1]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
[2]Институт спектроскопии РАН

Рассмотренные в данной работе соединения относятся к широко изучаемому классу двойных редкоземельных боратов со структурным типом природного минерала хантита. Это семейство соединений известно с 1960-х годов [1], и на данный момент имеется большое количество публикаций по его изучению. Такие кристаллы обладают химической стойкостью, механической прочностью, хорошими оптическими характеристиками (например, ярко выраженными нелинейными оптическими свойствами), относятся к материалам нового поколения для лазеров с самоудвоением и самосмешением частот [2,3]. Также некоторые его представители уже нашли

практическое применение, например, в работе [4] показано использование $Er,Yb:YAl_3(BO_3)_4$ в качестве кристалла лазерной генерации на длинах волн 1531, 1555, 1602 нм мощностью 1 Вт. С этой точки зрения, представляет интерес исследование похожих соединений, но с иным химическим составом.

Галлиевые бораты на настоящий момент представляют наименее изученную часть данного семейства. По имеющимся данным край их поглощения находится в УФ-части спектра, поэтому они перспективны в качестве синих и УФ-лазеров [5]. Они могут применяться в качестве медицинских лазеров, лазеров накачки оптических волокон, источников для космической связи и в качестве элементов атмосферных оптических зондов. Галлиевые бораты обладают ярко выраженными нелинейными оптическими свойствами, хотя менее выраженными, чем у алюминиевых боратов. Самоудвоение частоты и самосмешение частот позволяет получить лазерную генерацию на одном кристалле в широком диапазоне длин волн. Ожидается, что в следствие большого расстояния между редкоземельными ионами, которое составляет 6,028 Å, и отсутствия соединений между их полиэдрами, галлиевые бораты обладают большими временами жизни метастабильных уровней при больших концентрациях используемого редкоземельного иона в плоть до 100%. В настоящей работе были изучены концентрированные по редкоземельному иону галлиевые бораты с общей формулой $LnGa_3(BO_3)_4$, *Ln* = Nd, Sm, Er, Dy, Ho. Они обладают ромбоэдрической симметрией с пространственной группой *R*32, при этом ионы редкоземельных элементов находятся в центрах искаженных тригональных призм в нецентросимметричных позициях [6]. Образцы галлиевых боратов были выращены методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве в псевдотройной системе $LnGa_3(BO_3)_4$-Bi_2O_3-B_2O_3.

Спектры пропускания и люминесценции были зарегистрированы на фурье-спектрометре Bruker IFS 125 HR с разрешением 0,1 $см^{-1}$ в широком спектральном диапазоне (2000 – 20000 $см^{-1}$) при температурах: 5–10 К и 300 К. Измерения, проводимые при низких температурах, осуществлялись с использованием криостата замкнутого цикла Cryomech 403.

В результате работы были зарегистрированы спектры люминесценции редкоземельных галлиевых боратов (рис. 1,2). По полученным данным были определены оптические *f-f* переходы, получены их относительные интенсивности, проведено исследование штарковской структуры. Также нами было проведено измерение времён затухания люминесценции для наиболее интенсивных переходов в $EuGa_3(BO_3)_4$ (~614 нм), $HoGa_3(BO_3)_4$ (~434 нм), $NdGa_3(BO_3)_4$ (532 нм), которые составили 940 мкс, 140 мкс и 37,5 мкс, соответственно. Данное исследование необходимо для определения и расчета возможной лазерной генерации.

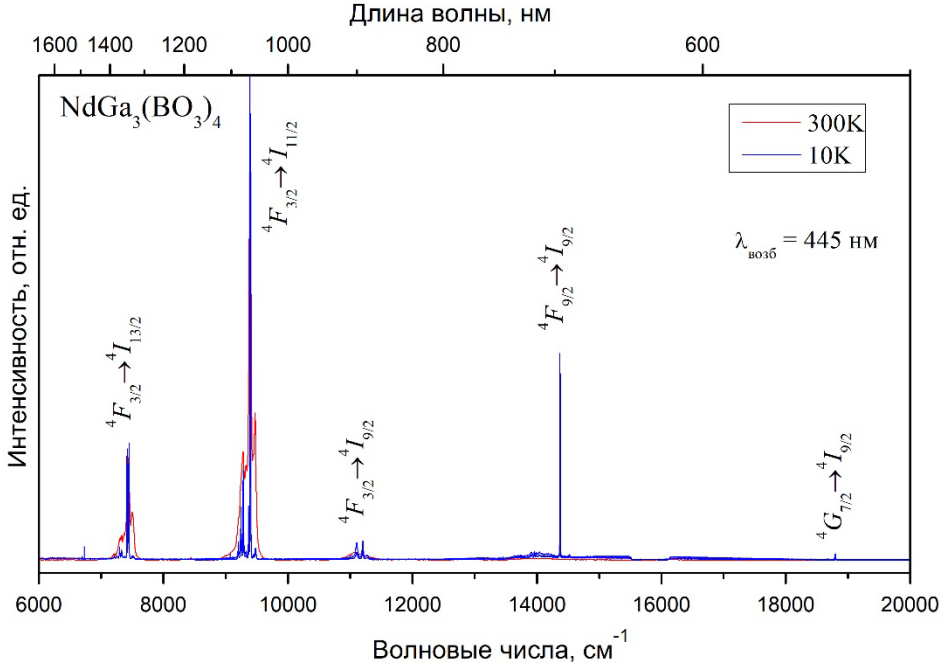


Рис. 1. Спектр люминесценции $NdGa_3(BO_3)_4$

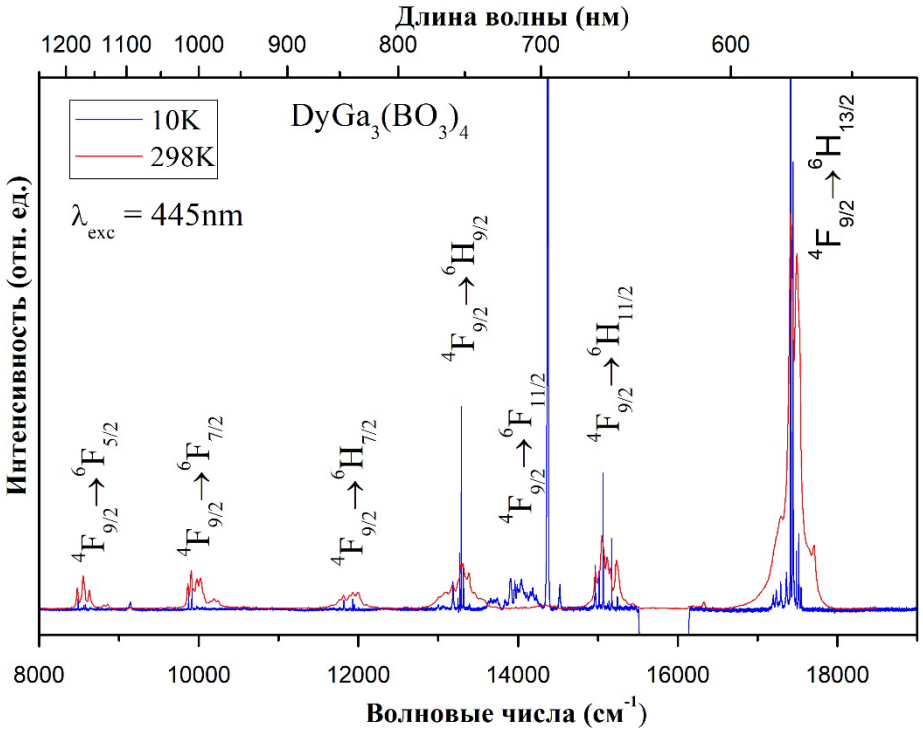


Рис. 2. Спектр люминесценции $DyGa_3(BO_3)_4$

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук МК-3577.2017.2.

Литература

1. *Ballman A.A.* A new series of synthetic borates isostructural with the carbonate mineral huntite // American Mineralogist: Journal of Earth and Planetary Materials. 1962. V. 47. N 11–12. P. 1380–1383.
2. *Jaque D.* Self-frequency-sum mixing in Nd doped nonlinear crystals for laser generation in the three fundamental colours: The NYAB case // Journal of alloys and compounds. 2001. V. 323. P. 204–209.
3. *Huang M.* [*et al.*], A CW blue laser emission by self-sum-frequency-mixing in Nd^{3+}:$GdAl_3(BO_3)_4$ crystal // Optics communications. 2002. V. 208. N 1. P. 163–166.
4. *Tolstik N.A.* [*et al.*], Efficient 1 W continuous-wave diode-pumped Er,Yb:$YAl_3(BO_3)_4$ laser //Optics letters. 2007. V. 32. N 22. P. 3233–3235.
5. *Borovikova E. Y.* [*et al.*], Crystal growth, structure, infrared spectroscopy, and luminescent properties of rare-earth gallium borates $RGa_3(BO_3)_4$, R= Nd, Sm–Er, Y // Optical Materials. 2015. V. 49. P. 304–311.
6. *Leonyuk N.I., Leonyuk L.I.* Growth and characterization of $RM_3(BO_3)_4$ crystals // Progress in Crystal Growth and Characterization of materials. 1995. V. 31. N 3. P. 179–278.

УДК. 535.372

Особенности электронных спектров GeV^- - центров в CVD-алмазах при низких температурах

***А.Ю. Нелюбов*[1], *А.А. Горшелев*[2], *А.В. Наумов*[2], *К.Н. Болдырев*[2], *В.Г. Ральченко*[3], *В.С. Седов*[3], *И.Ю. Еремчев*[1,2]**

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

В данной работе приводятся результаты низкотемпературных исследований бесфононных спектральных линий (БФЛ) малых ансамблей (вплоть до одиночных) GeV^--центров в алмазных пленках, выращенных CVD-методом.

В работе исследовался образец эпитаксиальной монокристаллической алмазной пленки, содержащий центры окраски типа германий – вакансия (GeV^-) в ультранизкой концентрации. Образец был выращен методом плазмохимического осаждения из газовой фазы (англ. Chemical

vapor deposition, CVD) в реакторе ARDIS-100 (2,45 ГГц) с использованием газа германа в качестве одного из компонентов синтеза [1]. В качестве подложки был использован алмазный монокристалл, полученный методом высоких давлений и высоких температур, с размерами 4 × 4 × 1 мм^3. Условия синтеза: реакционная газовая смесь $H_2/CH_4/GeH_4$ в соотношении «93,4% / 6% / 0,6%», соответственно, общий расход газа 500 станд.см^3/мин, давление в камере 130 Торр, СВЧ мощность 2,7 кВт. Толщина синтезированного эпитаксиального слоя 5 мкм.

Синтезированный образец помещался в самодельный криогенный флуоресцентный микроскоп, созданный на основе оптического He4 криостата (RTI). Измерения спектров возбуждения флуоресценции GeV^-–центров проводились в широком диапазоне низких температур (от 4,5 К до 70 К) с высоким пространственным (порядка 1 мкм) и спектральным разрешением (порядка 8 ГГц). Для этого мы использовали технику, которая применяется в методе криогенной спектромикроскопии одиночных молекул [2, 3]. Для возбуждения флуоресценции центров окраски использовался автоматизированный линейный перестраиваемый (от 560 до 630 нм) лазер на красителе Coherent CR599 с шириной линии 8,3 ГГц (0,01 нм в области 600 нм). Светосильный криогенный микрообъектив с высокой числовой апертурой позволял эффективно собирать сигнал стоксовой компоненты флуоресценции GeV центров и перебрасывать изображение поля зрения микроскопа на высокочувствительную ПЗС камеру Andor Ixon Ultra. Синхронная перестройка длины волны лазера с измерением флуоресцентных изображений позволяла измерить спектры возбуждения флуоресценции для различных точек образца одновременно.

Измеренные БФЛ GeV^-–центров в различных микроскопических областях образца группировались в спектральном интервале шириной порядка 2 нм с центром вблизи длины волны 601,5 нм. Исследованные спектры можно условно разделить на два типа. Первый представляет собой структуру, состоящую из двух спектральных дублетов (при температуре 5 К). Данный тип ранее наблюдался в спектрах люминесценции макроскопического образца, содержащего HPHT микроалмазы с GeV^-–центрами [4]. Необходимо отметить, что в нашем случае наблюдалась пространственная неоднородность спектров: соотношение между интенсивностями в линиях дублетов отличалось для разных микроскопических участков образца. Второй тип представлял собой совокупности узких спектральных линий, число которых варьировалось для разных участков образца. При повышении температуры до 40–70 К отдельные линии уширялись, что приводило к их спектральному перекрытию. В результате образовывался бесструктурный неоднородно уширенный контур (рис. 1), природа которого в данном случае может быть объяснена различием в спектральном положении отдельных БФЛ, что связано, по всей видимости, с отличиями в локальном окружении отдельных GeV^-–центров. Ответа на вопрос о том, принадлежат ли обнаруженные узкие линии отдельным GeV^-–центрам или же они являются спектральными сайтами для небольших подансамблей, центров окраски, находящихся в одинаковых условиях, в настоящий момент нет. Для однозначного ответа требуется измерение статистики фотонов, которое в данной работе не проводилось. Косвенным подтверждением, что большая часть ярких линий была сформирована подансамблем центров окраски, является отсутствие явно выраженного мерцания и спектральной диффузии. В то же время для части слабых линий наблюдались флуктуации интенсивности (вплоть до нуля), что может быть косвенным свидетельством того, что данные БФЛ принадлежат одиночным центрам окраски.

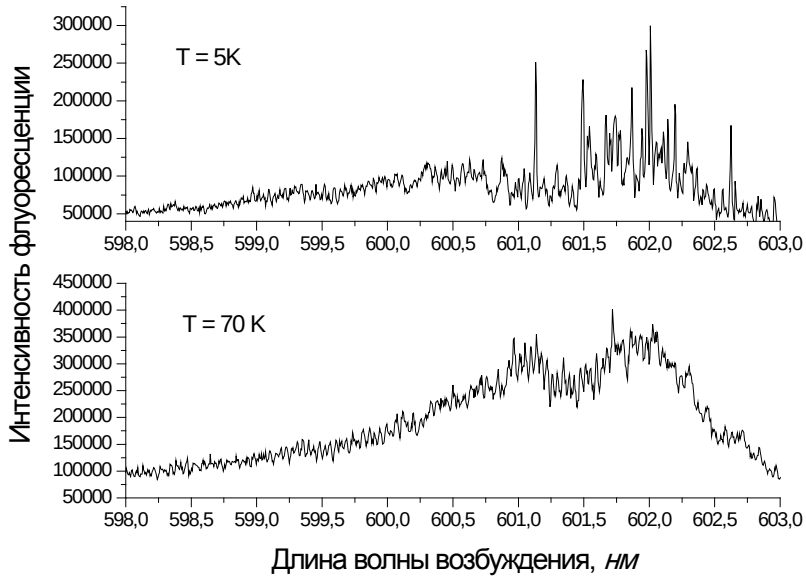


Рис. 1. Спектры возбуждения флуоресценции ансамбля GeV^--центров из малого объема CVD-алмаза (порядка 1 мкм^3), измеренных при температуре 5К (верхний график) и 70 К (нижний график). Нижний спектр представляет собой бесструктурный неоднородно уширенный контур, который распадается на совокупность узких БФЛ при понижении температуры

Литература

1. *Sedov V.,* [*et al.*] Growth of polycrystalline and single-crystal CVD diamonds with bright photoluminescence of Ge-V color centers using germane GeH4 as the dopant source // Diamond and Related Materials. 2018.
2. *Naumov A., Eremchev I.Y., and Gorshelev A.A.,* Laser selective spectromicroscopy of myriad single molecules: Tool for far-field multicolour materials nanodiagnostics // Eur. Phys. J. D. V. 68. N 11. 2014.
3. *Наумов А.В.* // Успехи физических наук. 2013. Т. 183. С. 633–652.
4. *Ekimov E.A., Lyapin S.G., Boldyrev K.N.* [*et al.*], Germanium-vacancy color center in isotopically enriched diamonds synthesized at high pressures // Pis'ma v ZhETF. V. 102. N 11. P. 811. 2015.

УДК 538.958

Магнонная мода в спектре комбинационного рассеяния

***Е.А Пузин*[2], *Г.Н. Абрамова*[1], *Ю.В. Герасимова*[1,2], *В.С. Жандун*[1], *А.Н. Втюрин*[1,2]**

[1]Институт физики им. Киренского СО РАН
[2]Сибирский федеральный университет

Представлены раман-спектры моносульфида марганца (MnS) с NaCl структурой в температурном интервале 4,2–400 K и интервале частот 0–30 см$^{-1}$. Мы зафиксировали пик на частоте 22 см$^{-1}$ при низкой температуре. Из зависимости частоты от температуры мы приписали его к одномагнонной моде при $k = 0$. Частота магнона была рассчитана используя Munich SPRKKR-package. Рассчитанная частота магнона совпадает с экспериментальной.

В работе [1] при сравнении данных КР для MnS с дисперсионными кривыми мы предложили следующее отнесение полос: пики с частотой $\omega = 226$ см$^{-1}$, $\omega = 340$ см$^{-1}$ являются TO и LO модами соответственно, остальные колебания соответствуют активации мод с L, X границ ЗБ [2]. При охлаждении (до 5 K) соединение остается стабильным, структурных фазовых переходов не происходит.

При понижении температуры в низкочастотной области при $T < 200$ K в спектре КР возникает слабое крыло, которое затем при $T < 120$ K развивается в интенсивную ассиметричную полосу, имеющую максимум 22 см$^{-1}$ при T = 5 K (рис. 1). Разница между реальной температурой кристалла в точке регистрации спектра, рассчитанной из соотношения стокс/антистокс, и

температурой хладопровода криостата, измеряемой встроенным датчиком, составляет примерно на 20 K выше, тогда появление первых признаков формирования низкочастотного спектра следует отнести к 140–150 K (измеряемая температура120–130 K). Напомним, что именно в этой области температур ~150 K был определен аниферромагнитный переход.

Для интерпретации экспериментальных данных рассматривался случай одной квазигармонической мягкой моды:

$$J(\Omega) = \mathrm{I}\frac{\Gamma\Omega_0^2}{\left(\Omega_0^2 + \Omega^2\right)^2 + \Gamma^2\Omega^2},$$

где Ω – частота комбинационного рассеяния, Ω_0 – частота активного колебания, Γ – полуширина активного колебания, I – амплитуда рассеяния (интегральная интенсивность).

Для теоретической оценки низкочастотной моды в центре зоны Бриллюэна при T = 0 K использовалось эмпирическое выражение из работы [3]:

$$\hbar\omega = \mathrm{S}\sqrt{24D\left(J_1 + J_2\right)},$$

где D – константа анизотропии; J_1, J_2 – константы обменного взаимодействия между первыми и вторыми соседями соответственно.

Для теоретического расчета типа магнитной структуры в MnS и констант обменного взаимодействия и анизотропии использовался spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) code [4,5] (the Munich SPRKKR-package), в основу которого положена multiple scattering theory by Korringa, Kohn and Rostoker [6,7].

В рамках данного подхода были рассчитаны энергии различных магнитных конфигураций и получено, что наиболее выгодным магнитным упорядочением является антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов атомов Mn в плоскостях, параллельных направлению [111] кубической ячейки. Для данной конфигурации были рассчитаны константы обменного взаимодействия и анизотропии, которые имеют следующие значения: J_1 = 1,6 мэВ, J_2 = 0,4 мэВ, D = 0,03 мэВ, S = 5/2. В результате была получена теоретическая оценка частоты магнонной моды в кристалле MnS при T = 0 K: $\omega = 24,2$ см$^{-1}$, что имеет близкое значение с полученной экспериментально частотой при T = 5 K: $\omega = 22$ см$^{-1}$.

Таким образом, интерпретируя полученные результаты на основе концепции одной квазигармонической мягкой моды, в которой частота боковых компонент обращается в нуль в точке потери устойчивости (в точке фазового перехода второго рода), но так как в соединении нет структурных фазовых переходов, мы можем утверждать, что наблюдаемая мода является одномагнонной модой, связанной с магнитным упорядочением, а ее появление в спектре рассеяния наблюдается ниже температуры магнитного перехода. Вычисленная частота магнона на основе простой модели, описанной в [3], и оценка обменной энергии также говорят в пользу рассеяния света магнитными возбуждениями.

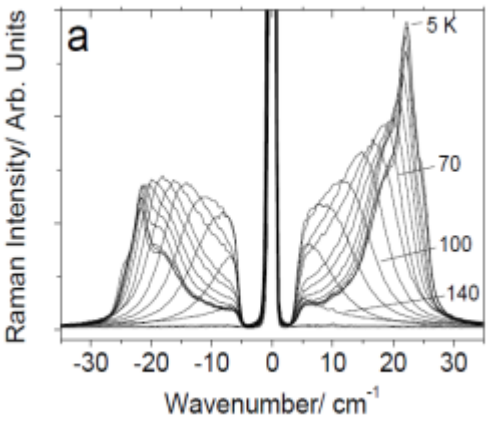


Рис. 1. Температурная зависимость низкочастотной стоксовой и антистоксовой частей спектра MnS

Литература

1. *Kavci O.;Cabuk S.* First-principles study of structural stability, elastic and dynamical properties of MnS // Computational Materials Science. 2014. 95. 99–105.

2. *Lines M.E. and Jones E.D.* // Phys. Rev. 1966. 141. 525.
3. *Milutinovic A., Tomic N., Devic S., Milutinovic P., and Popovic Z.V.* // Physical Review B. 2002. 66. 012302.
4. *Ebert H.* [*et al.*], The Munich SPR-KKR package, version 6.3, http://ebert.cup.uni-muenchen.de/SPRKKR
5. *Ebert H., Kodderitzsch D., Min J.* ¨ ar: ´ Rep. Prog. Phys. 2011. 74. 096501.
6. *Korringa J.* (1947). Physica. XIII (6–7): 392–400.
7. *Kohn W., Rostoker N.* // Phys.Rev. 1954. 94 (5): 1111–1120.

СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ

Председатель: Л.М. Зеленый (д.ф.-м.н., акад. РАН)

Зам. председателя: В.С. Бескин (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: А.Б. Нечаева

Дата: 20.11.2018

Время: 10:00-16:00

Место: Москва, ул. Профсоюзная, д. 84/32, ИКИ РАН

УДК 52-732 524.3-59

Продлённое излучение в кривых блеска космических гамма-всплесков, зарегистрированных экспериментом SPI-ACS INTEGRAL

***Г.Ю.Мозгунов*[1,2], *П.Ю.Минаев*[2], *А.С.Позаненко*[2]**

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

Космические гамма-всплески – одни из самых мощных катастроф во Вселенной. Открытые в 1967 г. [1], они до сих пор не нашли всеобъемлющего объяснения. Одной из загадок гамма-всплесков является продленное излучение, продолжающееся после завершения активной фазы всплеска.

Активная фаза всплеска длится от долей до сотен секунд и характеризуется значительной переменностью сигнала в гамма-диапазоне; активную фазу всплеска ассоциируют с работой «центральной машины», то есть с активным выделением энергии во время взрыва. После окончания активной фазы наблюдается послесвечение от рентгеновского до радиодиапазона, связанное с взаимодействием релятивистской ударной волны с окружающей межзвездной средой. Однако в некоторых гамма-всплесках было обнаружено существенно более длительное излучение в гамма-диапазоне, которое называют *продленным излучением*. Цель работы состоит в поиске и исследовании продленного излучения, что необходимо как для определения феноменологии, так и для выяснения его природы: не ясно, является ли продленное излучение продолжением активной фазы гамма-всплеска или же это начало пассивной фазы, то есть послесвечение.

В октябре 2002 года начала работу международная космическая обсерватория (КО) INTEGRAL, в составе которой находится сцинтилляционный детектор SPI-ACS [2]. На текущий момент зарегистрировано более 4000 гамма-всплесков в энергетическом диапазоне свыше 80 кэВ. Однако систематический поиск продленного гамма-излучения проводился лишь для выборки коротких гамма-всплесков, зарегистрированных до 2008 года [3]. В данной работе будет проведен систематический поиск продленного излучения для всех гамма-всплесков, зарегистрированных в эксперименте SPI-ACS до 2018 года.

Основной проблемой при выделении продленного излучения является стабильность фона, которая в эксперименте SPI-ACS обеспечивается высокоэллиптической орбитой КО INTEGRAL, большую часть времени находящейся выше радиационных поясов Земли. Процедура поиска продленного излучения в существенной мере опирается на корректное построение модели фона – ключевой для обнаружения продленного излучения. После определения и вычитания аналитической модели фона становится возможным определить параметры гамма-всплеска, в

частности, параметр длительности T_{90}, т.е. интервал времени, за которое детектор фиксирует 90% излучения от гамма-всплеска [4].

Для построения кривой блеска и дальнейшего поиска продлённого излучения используется алгоритм суммирования потока в соседних временных интервалах (исходное временное разрешение составляет 50 мс) до накопления статистической значимости более Nσ стандартных отклонений (см. напр. [2]). Величина Nσ не является постоянной, а зависит от числа накопленных интервалов: $N_\sigma = A_0 - \alpha \log_{10}(T)$, где T – суммарная длительность накопленных интервалов, параметры A_o и α определяют пороговый уровень значимости и подбираются индивидуально для каждого всплеска. Результат работы алгоритма представлен на рис. 1, где изображена кривая блеска гамма-всплеска после вычитания фона и процедуры суммирования. На интервале (T < 8 с) после начала гамма-всплеска хорошо видна его быстропеременная активная фаза. Зелёными вертикальными линиями выделен интервал 8 < T < 2000 с, который соответствует продлённому излучению.

Также предложен алгоритм количественного выделения продленного излучения, состоящий в построении временных интервалов различной длительности T_X, за которое детектор регистрирует X% излучения. Пример зависимости представлен на рис. 2. На нём видно, что после накопления 60% отсчётов характер зависимости изменяется (наблюдается излом), продлённое излучение начинает вносить более существенный вклад, чем активная фаза всплеска.

В работе мы обсуждаем устойчивость метода поиска и выделения продленного излучения и применимость к данным, полученным различными космическими обсерваториями, регистрирующими гамма-всплески. Представлены первые результаты поиска и исследования продленного излучения по данным эксперимента SPI-ACS/INTERAL.

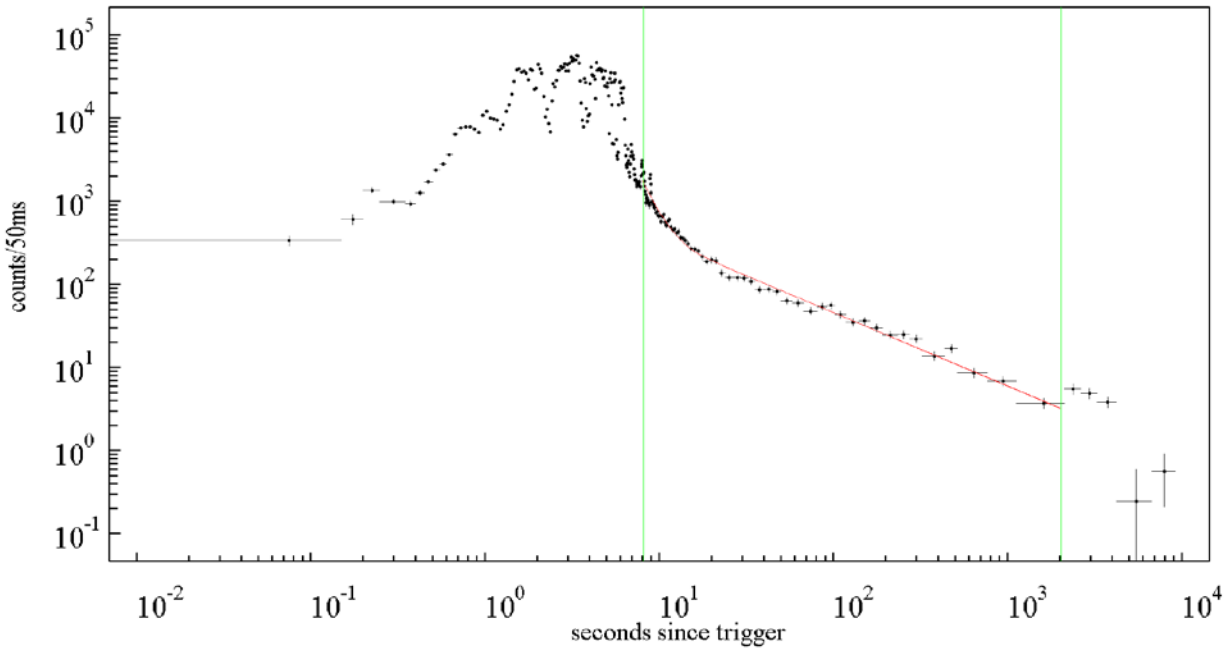


Рис. 1. Кривая блеска гамма-всплеска GRB 021206 в диапазоне выше 80 кэВ; по вертикальной оси отложена скорость счета отсчетов за 50 мс, по горизонтальной – время с момента срабатывания триггера; ошибки определения потока показаны на уровне одного стандартного отклонения

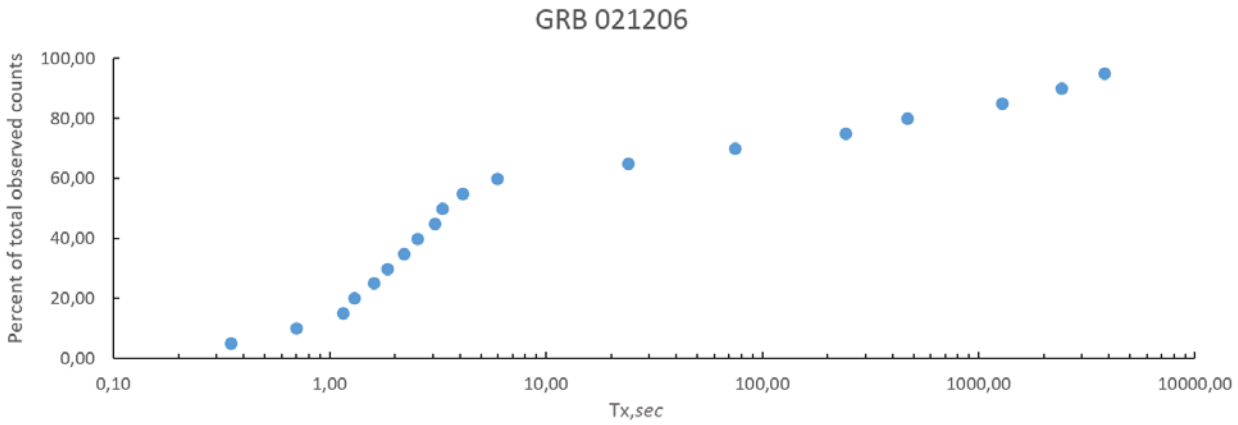


Рис. 2 Последовательность из длительностей T_X для всплеска GRB 021206; по горизонтальной оси – длительность T_X, по вертикальной – соответствующий процент от полного числа отсчётов гамма-всплеска

Литература

1. *Klebesadel R.W.* [*et al.*]. Observations of Gamma-Ray Bursts of Cosmic Origin // The Astrophysical Journal. 1973 June 1. 182:L85-L88.
2. *Von Kienlin A.* [*et al.*]. INTEGRAL Spectrometer SPI's GRB detection capabilities. GRBs detected inside SPI's FoV and with the anticoincidence system ACS // A&A. 2003. 411. L299–L305.
3. *Minaev P.Yu., Pozanenko A.S., Loznikov V.M.* Extended Emission from Short Gamma-Ray Bursts Detected with SPI-ACS/INTEGRAL // Astronomy Letters. 2010. V. 36. N 10. P. 707–720.
4. *Koshut T.M.* [*et al.*]. Systematic Effects on Duration Measurement of Gamma-Ray Bursts // The Astrophysical Journal. 1996. 463:570-592.

УДК 537.5

Об определении магнитного потока в релятивистском струйном выбросе в окрестности черной дыры

Е.Е. Нохрина

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Электромагнитный механизм энерговыделения в активных ядрах галактик связан с наличием внешнего регулярного магнитного поля, создаваемого аккреционным диском и вращающейся сверхмассивной ($M_{BH} = 10^6 - 10^{10} M_{Sun}$) черной дырой. Вращающаяся черная дыра работает как униполярный индуктор, в результате чего запускаются релятивистские струйные выбросы – джеты [1]. У основания этих выбросов основной поток энергии переносится в электромагнитной форме и связан с потоком вектора Пойнтинга. Далее происходит ускорение плазмы до лоренц-факторов порядка 10 и выше, и плотность потока кинетической энергии плазмы становится примерно равной плотности потока вектора Пойнтинга.

Полная мощность джета W_Ψ, связанная с начальной мощностью, переносимой электромагнитным полем у основания выброса, записывается как

$$W_\Psi = \frac{c}{8}\left(\frac{\Psi}{\pi R_L}\right)^2 . \qquad (1)$$

Здесь Ψ – это полный поток магнитного поля в выбросе, c – скорость света, и радиус светового цилиндра $R_L = c/\Omega_F$ связан с угловой скоростью вращения Ω_F магнитных поверхностей.

Сложность проверки формулы (1) по наблюдениям связана с тем, что как магнитный поток, так и полная мощность джета, определяются опосредованно. Для оценки величины магнитного поля в выбросе применяется измерение эффекта видимого сдвига ядра [2] – яркой стационарной компоненты джета на радиоинтерферометрических картах. Этот метод оценки величины магнитного поля в джете позволяет восстановить величину поля B_{cs} в предположении его

однородности поперек джета. Кроме того, в выбросах доминирующей почти на всех масштабах является тороидальная компонента магнитного поля, связанная с током, текущим в выбросе, тогда как магнитный поток определяет полоидальная компонента магнитного поля. Для оценки потока по магнитному полю, полученному с помощью эффекта видимого сдвига ядра, необходимо моделирование поперечной структуры магнитного поля в рамках магнитной гидродинамики. Простейшая модель позволяет связать амплитуды полоидальной и тороидальной компонент магнитного поля, а также амплитуды полей с величиной однородного поля B_{cs}, оцениваемого по наблюдениям, и записать следующее выражение для величины потока:

$$\frac{\Psi}{\pi R_L} = 0.86 B_{cs} R_{jet} \left(1 + 2 \ln \frac{R_{jet}}{R_L} \right). \qquad (2)$$

Здесь R_{jet} – радиус выброса на расстоянии 1 пк от основания, и он может быть определен по измеренным углам раскрыва джета [3]. Из формулы (2) видно, что без оценки величины радиуса светового цилиндра магнитный поток определить невозможно. Но в формулу (1) выражение из левой части (2) входит целиком, тогда как правая часть (2) зависит от неизвестного R_L логарифмически.

Для сравнения мощности джета (1) с наблюдениями мы используем полученную в [4] корреляцию средней мощности джета с мощностью джета в диапазоне 200–400 МГц

$$\left(\frac{W_{jet}}{10^{43}\ \text{эрг/с}} \right) = 3.5 \left(\frac{W_{200-400}}{10^{40}\ \text{эрг/с}} \right)^{0.64}. \qquad (3)$$

Данные для определения $W_{200-400}$ взяты из базы данных CATS, аккумулирующей данные различных каталогов [5].

Мы исследовали выборку из 48-ми источников с измеренными сдвигами ядер и удовлетворяющие требованиям применимости формулы (2). Результаты представлены на рис. 1. Распределение источников по отношению мощности, оцененной разными методами, хорошо центрировано вблизи значения $W_\Psi = W_{jet}$. Примерно 60% источников имеют среднюю мощность, сравнимую с мощностью, связанной с потоком электромагнитной энергии у основания релятивистского струйного выброса.

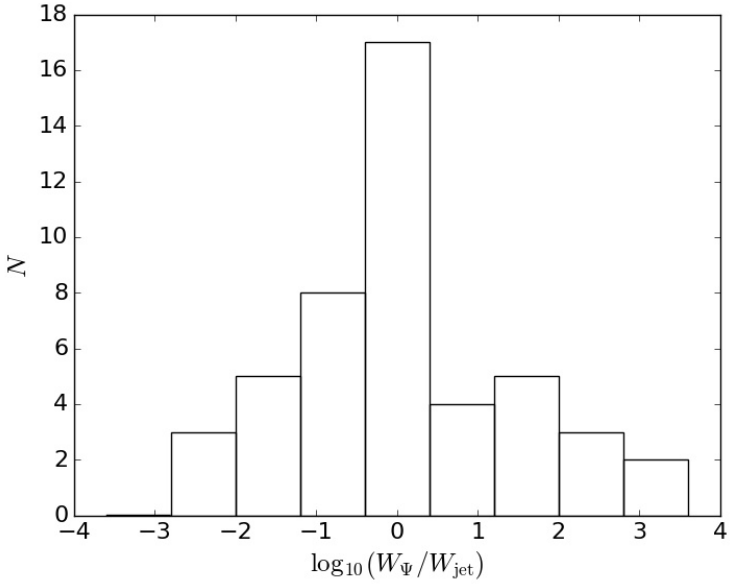


Рис. 1. Гистограмма распределения источников в зависимости от отношения мощности, связанной с поток магнитного поля, и оцененной полной средней мощности выброса

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант 16-12-10051.

Литература

1. *Blandford, R.D., Znajek, R.L.* Electromagnetic extraction of energy from Kerr black holes // MNRAS. 1979.

V. 179. P. 433.
2. *Lobanov A.P.* Ultracompact jets in active galactic nuclei // A&A. 1998. V. 330. P. 79.
3. *Pushkarev A.B., Kovalev Y.Y., Lister M.L., Savolainen T.* Jet opening angles and gamma-ray brightness of AGN // A&A. 2009. V. 507. P. L33.
4. *Cavagnolo K.W., McNamara B.R., Nulsen P.E.J., Carilli C.L., Jones C., Birzan L.* A relationship between AGN jet power and radio power // ApJ. 2010. V. 720. P. 1066.
5. *Verkhodanov O.V., Trushkin S.A., Andernach H., Chernenkov V.N.* The CATS database to operate with astrophysical catalogs. // In: G. Hunt & H.E. Payne (eds.) Astronomical Data Analysis Software and Systems VI (San Francisco: ASP). 1997. V. 125. P. 322.

УДК 533.951.7

Зональные течения двумерной вырождающейся магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости

Т.А. Зиняков, А.С. Петросян

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

Работа посвящена изучению двумерной вырождающейся магнитогидродинамической турбулентности в плазме в приближении бета-плоскости, характерной для различных астрофизических объектов: солнечный тахоклин, атмосферы магнитоактивных экзопланет, атмосферы нейтронных звезд.

Используются уравнения эволюции завихрённости ω и потенциала магнитного поля A:

$$\omega_t = J(\psi, \omega) + \beta\psi_x + J(A, \Delta A) + \nu\,\Delta\omega, \quad (1)$$

$$A_t = J(\psi, A) + \eta\Delta A, \quad (2)$$

где ψ – функция тока ($\omega = -\Delta\psi$), β – параметр Россби, ν – кинематическая вязкость и η – коэффициент диффузии магнитного поля. Функция $J(a,b) = a_x b_y - a_y b_x$ – якобиан функций $a(x,y)$ и $b(x,y)$.

Для численного моделирования системы уравнений (1–2) используется псевдоспектральный метод с деалиасингом по правилу 2/3. Для интегрирования системы по времени используется схема Мацуно.

Представлены результаты численных моделирований двумерной магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости на пространственной квадратной сетке 1024×1024 с периодическими граничными условиями. Получено, что в двумерной магнитогидродинамической турбулентности на бета-плоскости образуются только нестационарные зональные течения со сложной временной динамикой (рис. 1). Показано, что нестационарность течений вызвана возникновением в системе изотропных магнитных островов вследствие влияния силы Лоренца.

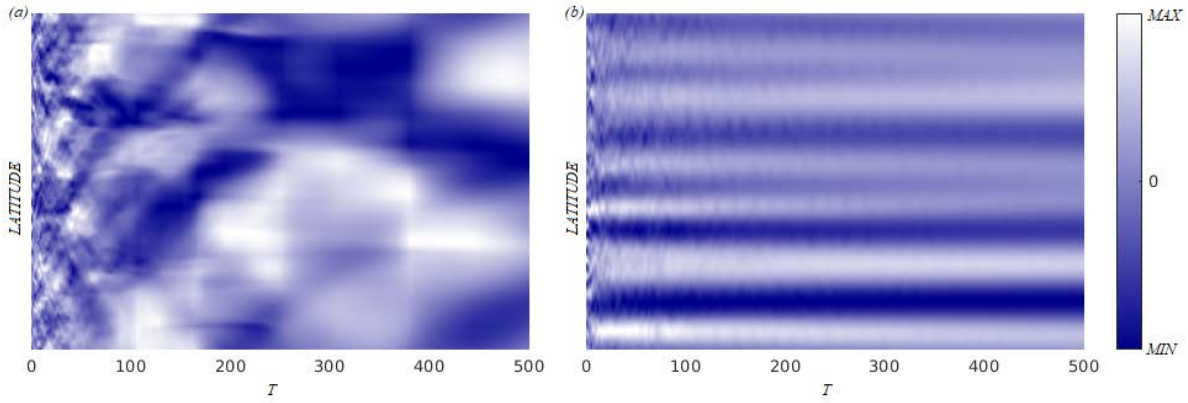


Рис. 1. Зависимость усредненной по зональному направлению зональной скорости $V^x(y)$ от времени и широты двумерной затухающей МГД турбулентности на β-плоскости (a) и турбулентности в нейтральной жидкости на β-плоскости (b). $\beta = 10$

УДК 52-782

Исследование автомодельного решения о распространении сильной ударной волны в расширяющейся Вселенной

***С.А. Панафидина*[1,2], *Г.С. Бисноватый-Коган*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт 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 γ принципиально отличаются друг от друга.

Приведем точное решение для сильных ударных волн, распространяющихся в однородной расширяющейся самогравитирующей среде со скоростью, стремящейся у нулю со временем. Уравнения в сферических координатах в этом случае записаны 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 $r\left(\delta / ET^4\right)^{1/5}$. 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: $Z = \frac{(\gamma-1)(1-V)\left(V-\frac{5}{6}\right)^2}{2\left(V-\frac{5}{6}-\frac{1}{6\gamma}\right)}$.

Тогда решение для $V(\xi)$ будет выглядеть следующим образом:

$$\xi = \left[(\gamma+1)\left(3V-\frac{5}{2}\right)\right]^{\mu_1}\left[\frac{(\gamma+1)(6\gamma V-5\gamma-1)}{\gamma-1}\right]^{\mu_2}\left[\frac{6(\gamma+1)\left(3\gamma V-V-\frac{5}{2}\right)}{15\gamma^2+\gamma-22}\right]^{\mu_3},$$

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.

Литература

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.
3. *Седов Л.И.* Методы подобия и размерностей в механике. М.: Наука, 1977.

УДК 524.882

Линзирование конуса световых лучей керровской черной дырой

П.С. Самородская, С.В. Репин

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

Тенью черной дыры называется область небесной сферы вблизи черной дыры, из которой к наблюдателю не могут прийти никакие световые лучи. Прямое наблюдение теней черных дыр является одной из самых важных задач современной астрофизики. Эта задача является чрезвычайно сложной технически из-за крайне малого углового размера тени. Так, тень черной дыры в центре Галактики имеет размер около 54 мкс дуги.

При построении теней черных дыр необходимо считать большое количество траекторий квантов в механике общей теории относительности (ОТО). При этом часто встречаются неожиданные эффекты, у которых нет аналога в классических механике. Один из таких эффектов рассмотрен в настоящей работе.

Предположим, что источник испускает свет в узком конусе и ось этого конуса направлена на керровскую черную дыру, за которой на большом расстоянии находится плоский экран. В этом случае на экране возникает большое пятно рассеянных дырой квантов, плотность в котором увеличивается при приближении к центру. При этом в центральной части появляется малая область, в которую кванты практически не приходят (рис. 1). Причина этого в том, что даже крайние кванты в пучке слишком сильно отклоняются черной дырой, т.е. кванты, выпущенные правее дыры, приходят в левую часть экрана, а выпущенные левее – в правую, и в центр экрана почти ничего не попадает.

В работе эффект исследован в «чистом» виде: рассмотрено, какое изображение дает на экране луч в форме полого конуса, ось которого направлена на черную дыру. При очень большом угле раствора конуса отклонение должно быть слабым и изображение будет близко к окружности большого радиуса. При малом угле раствора отклонение будет сильным, лучи справа и слева будут за дырой перекрещиваться, уходя далеко от центра, и изображение снова будет близко к окружности большого радиуса. Наибольший интерес представляет промежуточный случай. Здесь для черной дыры с метрикой Шварцшильда возможна ситуация, когда все лучи соберутся в точку и в этом случае черная дыра будет напоминать простую линзу. В метрике Керра инерциальная система отсчета вращается и, значит, лучи, обошедшие черную дыру, не могут прийти в одну точку. При последовательном увеличении угла раствора конуса они будут образовывать структуры, показанные на рис. 2. При этом если оба: источник и экран находятся на расстоянии $L = 500\, r_g$ от черной дыры, где $r_g = 2Gm/c^2$, то минимальный радиус изображения на экране приблизительно равен $2r_g$, а угол при вершине конуса составляет $2 \cdot \arctan(32{,}5/500)$. Для других значений расстояний эти величины также можно получить численным моделированием.

В реальных астрофизических объектах такие изображения, возможно, удастся наблюдать в джетах из активных ядер галактик или в тесных двойных системах с компактным компонентом.

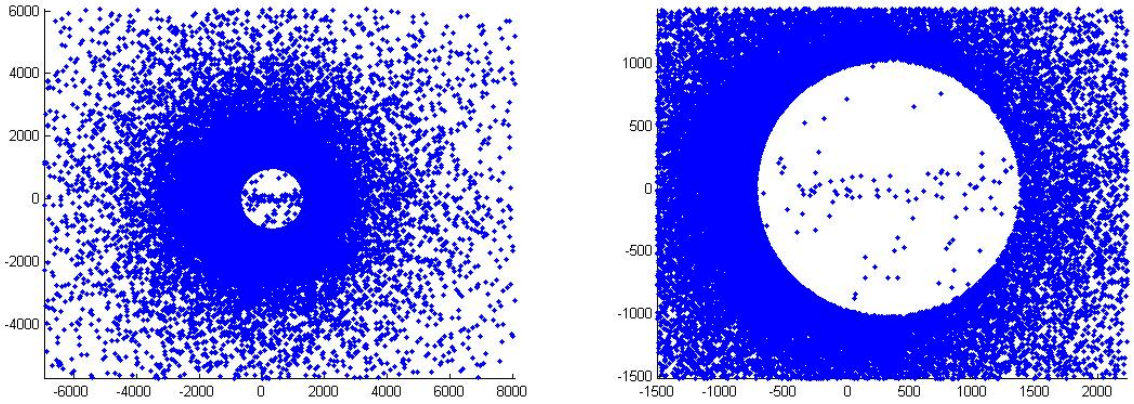


Рис. 1. Изображение, которое получается на экране, расположенном за чёрной дырой, освещаемой коническим источником света. Показано в двух различных масштабах

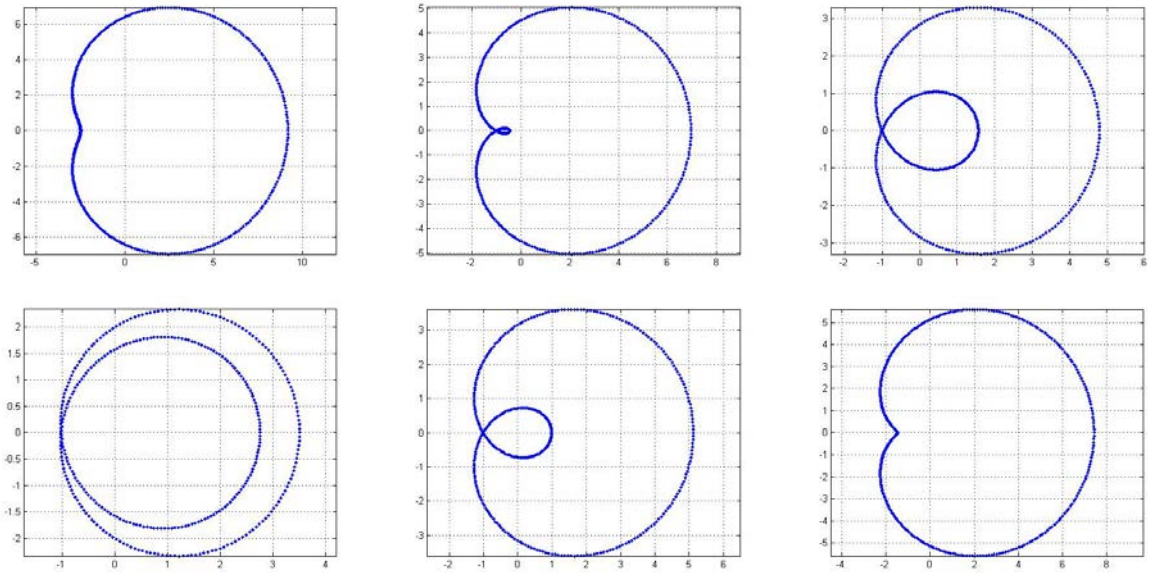


Рис. 2. Модели изображений, которые возникают на экране, расположенном за чёрной дырой, освещаемой полым коническим источником света, при последовательном уменьшении угла раствора конуса

УДК 524.7-77

Связь между широкополосными радиоспектрами и парсековой структурой внегалактических радиоисточников по результатам наблюдений полной выборки радиоисточников склонением выше +75 градусов

А.В. Попков[1]***, Ю.Ю. Ковалев***[1,2,3]***, Л.Ю. Петров***[4]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[3]Max Plack Institute for Radio Astronomy, Bonn, Germany
[4]NASA GSFC, USA

Мы представляем результаты совместного анализа структуры, наблюдаемой на РСДБ (радиоинтерферометр со сверхдлинной базой), и широкополосных радиоспектров полной выборки внегалактических радиоисточников, имеющих склонение более +75° и плотность потока на частоте 1,4 ГГц более 0,2 Ян [1]. Все источники выборки являются активными ядрами галактик. Данное исследование имеет своими целями:

1. Определить долю объектов с яркими релятивистскими джетами среди всех внегалактических радиоисточников.
2. Исследовать соотношение между компактностью источника и формой его широкополосного спектра в радиодиапазоне.

Общепринятой является точка зрения, что источники с плоским спектром являются компактными и имеют релятивистский джет, направленный в сторону наблюдателя под малым углом к лучу зрения. При этом в излучении доминирует оптически толстое ядро джета, плоский спектр которого обусловлен синхротронным самопоглощением. Напротив, если джет направлен под большим углом к лучу зрения, для наблюдателя он является оптически тонким, и его синхротронное излучение должно иметь круто падающий спектр. На основании этого источники с круто падающим спектром обычно считаются протяжёнными и, следовательно, не представляющими интереса для РСДБ-исследований. В данной работе был предпринят анализ связи компактности и радиоспектра для полной по потоку выборки активных ядер галактик, чтобы наблюдательно проверить справедливость данной картины.

Нами был проведен и обработан обзор источников исследуемой выборки на РСДБ-сети VLBA на частотах 2,3 и 8,6 ГГц, а также использованы их мгновенные широкополосные радиоспектры, полученные на телескопе РАТАН-600 на шести частотах от 1 до 22 ГГц [2]. Изучена зависимость таких параметров, как наличие детектирования на VLBA, компактность и размер, от

формы интегрального спектра (плоский, крутой, с пиком) и спектрального индекса. Спектральный индекс α определялся путём аппроксимации данных РАТАН-600 для частот 2,3 ГГц, 4,8 ГГц и 7,7 ГГц степенным законом $S \sim \nu^{\alpha}$. Источники с плоским спектром ($\alpha > -0{,}5$) составляют 8% выборки, источники с крутым спектром ($\alpha < -0{,}5$) — 91%, источники с пиком в спектре в исследуемом диапазоне частот — 1%.

Наш анализ дает следующие результаты:

1. Подтверждено, что почти 100% источников с плоским спектром, а также все источники со спектром, имеющим пик в гигагерцовом диапазоне, имеют компактные яркие джеты.
2. Среди источников с крутым спектром примерно 1/5 были продетектированы на VLBA, что свидетельствует о наличии у них компактных деталей.
3. Подтверждена положительная корреляция между компактностью источников и их спектральными индексами. В то же время показано, что среди источников с наивысшей компактностью присутствуют источники как с плоским, так и с крутым спектром.

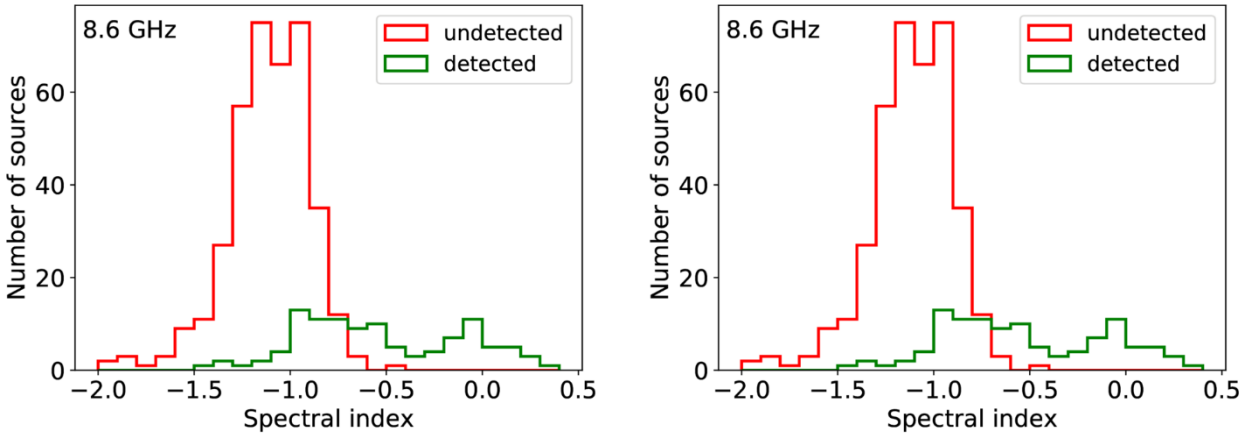


Рис. 1. Распределение числа продетектированных (красная гистограмма) и непродетектированных (зелёная гистограмма) на VLBA источников в зависимости от спектрального индекса по данным РАТАН-600. На левом рисунке показаны детектирования на частоте 2,3 ГГц, справа — на 8,6 ГГц

Литература

1. *Condon J.J.* [*et al.*]. The NRAO VLA Sky Survey // The Astronomical Journal. 1998. V. 115. P. 1693–1716.
2. *Мингалиев М.Г.* [*и др.*]. Спектральные характеристики радиоисточников вблизи Северного полюса мира // Астрономический журнал. 2007. Т. 84. С. 387–408.

УДК 523.9-355

Спектр Солнца в ближнем инфракрасном диапазоне по данным ACS NIR на борту TGO

***К.Р. Гизатуллин*[1,2], *А.Ю. Трохимовский*[1], *А.А. Федорова*[1], *О.И. Кораблёв*[1], *F. Montmessin*[3], *Д.С. Бецис*[1], *J.-L. Bertaux*[1,3], *M. Spite*[5], *и команда ACS*[3]**

[1]Институт космических исследований РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]LATMOS, CNRS/UVSQ/IPSL
[4]ACRI-ST, Sophia Antipolis
[5]GEPI Observatoire de Paris, CNRS

Детальное знание солнечного спектра высокого разрешения в ближнем инфракрасном диапазоне является важным аспектом точного моделирования переноса излучения, а также полинейного (line-by-line) расчета спектров атмосфер планет при решение различных задач. Между тем до сих пор существует ограниченное количество спектров Солнца в этом диапазоне, полученных путем прямых наблюдений. Одним из лучших на сегодняшний момент является внеатмосферный солнечный спектр CAVIAR (Continuum Absorption at Visible and Infrared Wavelengths and its Atmospheric Relevance) [1]. Поскольку этот спектр получен по наземным

измерениям с высоким разрешением, он может содержать неточности в окнах непрозрачности земной атмосферы, в частности, 1,3–1,5 мкм [2].

Комплекс ACS – российский вклад в совместную миссию ESA и Роскосмоса ЭкзоМарс 2016 TGO (Trace Gas Orbiter) [3]. Аппарат TGO вышел на орбиту Марса в октябре 2016 года. ACS – это комплекс из трех инфракрасных спектрометров в диапазоне от 0,7 мкм до 17 мкм с высокой разрешающей способностью (более 10 000).

ACS NIR – инфракрасный спектрометр в составе комплекса, работающий в диапазоне 0,76–1,65 мкм с разрешающей способностью ~ 25 000 [4]. Принцип работы основан на комбинации дифракционной эшелле решетки и акустооптического перестраиваемого фильтра (АОПФ). Одной из задач спектрометра является измерение в режиме солнечных затмений на орбите Марса. Это первый инструмент за пределами атмосферы, нацеленный на наблюдения Солнца и имеющий такое высокое спектральное разрешение в диапазоне от 1 до 2 мкм.

В этом докладе будет показан солнечный спектр и этапы его восстановления из измерений прибора ACS NIR. В частности, получение коэффициентов для коррекции плоского поля (flat field). Работа сделана на основе измерений Солнца, проведенных в июне 2016 года в ходе полетных проверок комплекса TGO (MCC, Mars Cruise Check-out). В солнечном спектре NIR наблюдаются не обнаруженные до этого солнечные линии и прочие отклонения от солнечного спектра CAVIAR в диапазоне 1,3–1,5 мкм, где полоса поглощения водяного пара не позволяет измерить чистый солнечный спектр с помощью наземных наблюдений. Также будет показано сравнение с теоретическим спектром Солнца в ближнем ИК-диапазоне [5].

Ключевые слова: ExoMars, TGO, ACS, солнечный спектр.

Литература

1. *Menang, Kaah P.,* [*et al.*]. A high-resolution near-infrared extraterrestrial solar spectrum derived from ground-based Fourier transform spectrometer measurements // Journal of Geophysical Research: Atmospheres. 2013. 118.11: 5319-5.
2. *Elsey, J., Coleman, M.D., Gardiner, T., & Shine, K.P.* (2017). Can measurements of the near-infrared solar spectral irradiance be reconciled? A new ground-based assessment between 4,000 and 10,000 cm−1 // Geophysical Research Letters, 44, 10,071–10,080. https://doi.org/10.1002/2017GL073902.
3. *Korablev, O.,* [*et al.*]. Three infrared spectrometers, an atmospheric chemistry suite for the ExoMars 2016 trace gas orbiter. Journal of Applied Remote Sensing 8.1 (2014): 084983.
4. *Trokhimovskiy, A.,* [*et al.*]. Near-infrared echelle-AOTF spectrometer ACS-NIR for the ExoMars trace gas orbiter. Infrared Remote Sensing and Instrumentation XXIII. Vol. 9608. International Society for Optics and Photonics, 2015.
5. *Chance, K., and Kurucz R.L.* An improved high-resolution solar reference spectrum for earth's atmosphere measurements in the ultraviolet, visible, and near infrared // Journal of quantitative spectroscopy and radiative transfer. 2010. 111.9: 1289-1295.

УДК 523.4-83.652

Сезонные карты CO_2 льда по данным СПИКАМ/Марс-Экспресс

***А.А. Ломакин*[1,2], *А.А. Федорова*[1], *О.И. Кораблев*[1], *Н.А. Евдокимова*[1], *Ф. Монтмессан*[3]**

[1]Институт космических исследований РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]LATMOS – UVSQ/UPMC/CNRS

CO_2 цикл определяет фундаментальные процессы как на поверхности, так и в атмосфере Марса. На полюсах конденсация большой части атмосферы (до 30%) вызывает сезонный рост и отступление полярных шапок [1], изменяя отражательную и излучательную способность поверхности, что имеет огромные последствия для энергетического бюджета планеты [2], меняет локальный и глобальный климат на планете [3].

ИК-спектроскопия – один из способов измерения количества CO_2 льда на поверхности Марса. CO_2 лед имеет узкие полосы поглощения в ближнем ИК-диапазоне, которые позволяет отличить его от газового поглощения атмосферы. Эти полосы позволили получить сезонную эволюцию и сублимацию CO2 льда на полярных шапках [4]. Тем временем спектр углекислого льда

на полюсах в ближнем ИК-диапазоне до сих пор детально не изучен из-за того, что другие спектрометры, находящиеся на орбите Марса, не могут разрешить узкие полосы поглощения.

Спектрометр СПИКАМ-ИК выполняет наблюдения атмосферы и поверхности Марса в ближнем ИК-диапазоне (1–1,7 мкм, разрешающая способность ~ 2000) с 2004 года.

Наблюдения содержат информацию о распределении льдов на поверхности Марса с 27 по 34 Марсианские годы. Анализ этого массива данных все еще не был выполнен. Для обработки наблюдений и получения "чистого" спектра поверхности нами был разработан алгоритм очистки от атмосферных полос поглощения, основанный на последний версии спектроскопической базы данных HITRAN2016 [5] и Марсианской модели общей циркуляции MCD v5.3 [6]. В докладе будут представлены спектры поверхности высокого спектрального разрешения над полюсами Марса и сезонные карты межгодовых вариаций углекислого льда на поверхности.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации – грант 14.W03.31.0017.

Литература

1. *Piqueux S., Byrne S., Kieffer H., Titus T., Hansen C.*, Icarus, Volume. 2015. 251. P. 332–338,https://doi.org/10.1016/j.icarus.2014.12.014.
2. *Wood S.E., David A.Paige*, Icarus (1992), V. 99, Iss. 1, P. 15–27; doi: 10.1016/0019-1035(92)90167-6.
3. *Hourdin* [*et al.*]. Workshop on Atmospheric Transport on Mars P 16–17.
4. *Langevin, Y.*, [*et al.*]. (2006), Nature 442(7104): 790-792.
5. *Rothman, L.* [*et al.*]. The hitran2012 molecular spectroscopic database // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 130:4–50, 2013.
6. *Millour E.* [*et al.*]. The Mars Climate Database (MCD version 5.2) // European Planetary Science Congress 2015, V. 10, P. EPSC2015–438. EPSC, 2015.

УДК 533.951.7

Численное моделирование магнитогидродинамической турбулентности в трехмерной вращающейся плазме

Р.А. Сиразов, А.С. Петросян

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

Турбулентность является широко распространенным состоянием космической плазмы во многих астрофизических, гелиофизических, геофизических процессах. Работа посвящена численному моделированию однородной магнитогидродинамической турбулентности во вращающейся плазме.

Изучается пространственно-временная динамика трёхмерной вращающейся плазмы, находящейся в турбулентном состоянии при высоких значениях гидродинамического и магнитного чисел Рейнольдса. Исходные уравнения магнитной гидродинамики запишем в виде:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nu \cdot \nabla^2 \vec{u} = \vec{u} \times (\vec{\omega} + 2 \cdot \vec{\Omega}) + \vec{j} \times (\vec{B_0} + \vec{b}) - \nabla \vec{P}, \quad (1)$$

$$\nabla \vec{u} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \vec{b}}{\partial t} - \eta \cdot \nabla^2 \vec{u} = \vec{\nabla} \times (\vec{u} \times (\vec{B_0} + \vec{b})), \quad (3)$$

$$\nabla \vec{b} = 0, \quad (4)$$

где $\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{u}$ – завихренность, $\vec{j} = \vec{\nabla} \times \vec{b}$ – электрический ток, ν – кинематическая вязкость, η – коэффициент магнитной диффузии, $\vec{u}$ – скорость, $\vec{B_0}$ – внешнее магнитное поле, $\vec{b}$ – турбулентная

добавка к магнитному полю. Уравнение Навье–Стокса (1) включает в себя силы Кориолиса и Лоренца. Давление $\boldsymbol{P}$ включает в себя давление магнитного поля и давление, возникающее вследствие действия центробежной силы.

Для решения уравнений (1–4) разработан программный код, позволяющий рассчитывать пространственно-временную динамику системы. В качестве вычислительного метода используется псевдоспектральный метод решения дифференциальных уравнений в частных производных с использованием быстрого преобразования Фурье. В качестве временной схемы используется метод Эйлера с пересчетом:

$$f^* = f^n + F(f^n)\Delta t,$$
$$f^{n+1} = f^n + F(f^*)\Delta t.$$

Для решения проблемы алиасинга используется правило $2/3$, в виде ограничения сетки в фурье-пространстве кубической областью $-N/3 < k_x, k_y, k_z < N/3$, что позволяет исключить ложные решения.

Изучается турбулентность в трёхмерной области размером $2\pi \times 2\pi \times 2\pi$ и периодическими граничными условиями. Начальные условия для поля скоростей заданы в виде ротора случайного изотропного векторного потенциала поля скоростей. В качестве начальных условий для магнитного поля используется постоянное магнитное поле, сонаправленное с вектором Ω. В работе проводятся вычисления на сетках размером до $128 \times 128 \times 128$.

Для реализации программного кода используется язык программирования CUDA C.

Проведённые вычисления обнаруживают прямой каскад кинетической энергии, а также взаимодействие трехмерной турбулентности с магнитным полем.

Литература

1. *Favier B., Godeferd F.S., Cambon C.* On the effect of rotation on magnetohydrodynamic turbulence at high magnetic Reynolds number // Geophysical & Astrophysical Fluid Dynamics 106(1), P. 89–111.

УДК 533.9.01

Сжимаемые магнитогидродинамические течения астрофизической плазмы в приближении мелкой воды

***Д.А. Климачков*[1], *А.С. Петросян*[1,2]**

[1]Институт Космических Исследований РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)

Большинство наблюдаемых объектов во Вселенной находится в состоянии плазмы. Изучение плазменных сред и плазменных объектов вне земной атмосферы является предметом плазменной астрофизики, включающей область астрофизики (вне солнечной системы), а также область космической физики (Солнце). В широком смысле целью плазменной астрофизики является изучение и описание поведения плазмы, для того чтобы понять детальную эволюцию различных объектов, наблюдаемых во Вселенной: от звезд и планетных систем до галактик и скоплений галактик. В последнее время активно развиваются теоретические и численные исследования, направленные на решение фундаментальной проблемы описания и изучения многомасштабных течений астрофизической плазмы путем исследования общих свойств, характеризующих различные объекты во Вселенной. Практически, речь идет о развитии идей геофизической гидродинамики с учетом отличий в поведении плазменных течений вследствие присутствия магнитных полей, а также сжимаемости, характеризующей большинство наблюдаемых объектов во Вселенной. Первые экспериментальные наблюдения крупномасштабных плазменных течений (например, на Солнце [1], [2]) выполнены на основе изучения магнитных полей или с помощью методов астросейсмологии, что естественным образом мотивирует развитие магнитогидродинамической теории с учетом как эффектов сжимаемости, так и эффектов магнитных полей. Заметим, что полная система уравнений магнитной гидродинамики сжимаемой плазмы достаточно сложна как для теоретического анализа, так и для численного моделирования, поэтому в работе мы предлагаем магнитогидродинамические уравнения в приближении мелкой воды с учетом сжимаемости плазмы.

Выведенные в [3] уравнения обобщаются в настоящей работе на случай тонкого вращающегося слоя сжимаемой плазмы со свободной границей в поле силы тяжести во внешнем вертикальном магнитном поле. Предложены две системы уравнений: сжимаемые уравнения с полным учетом силы Кориолиса и сжимаемые уравнения на бета-плоскости [4].

Волнами Россби здесь мы называем крупномасштабные волны, возникающие вследствие сохранения полной завихренности во вращающейся плазме и распространяющиеся вследствие широтных неоднородностей силы Кориолиса для сферического случая, по аналогии с нейтральной жидкостью. Волны Россби определяют крупномасштабную динамику солнца и звезд, динамику магнитоактивных атмосфер экзопланет, захваченных приливами от несущей звезды, течения в аккреционных дисках нейтронных звезд. Крупномасштабные волны Россби в нейтральной жидкости определяют глобальную динамику планетных атмосфер. В нашей работе мы развиваем теорию линейных волн и нелинейных взаимодействий в течениях астрофизической плазмы при учете сжимаемости. Для этого мы используем предложенную систему уравнений в приближении мелкой воды на бета-плоскости, в котором параметр Кориолиса линейно зависит от широты, и получаем зависимость дисперсионных уравнений, коэффициентов взаимодействия трех волн в приближении слабой нелинейности и инкрементов параметрических неустойчивостей от характеристик сжимаемости среды и термодинамических характеристик вращающейся плазмы.

Упрощенная система магнитогидродинамических уравнений в приближении мелкой воды, используемая в настоящей работе, получается из исходных уравнений магнитной гидродинамики сжимаемой плазмы усреднением по глубине в предположении гидростатичности распределения давлений и малости толщины слоя по отношению к характерному горизонтальному линейному размеру задачи. В результате в этом приближении фильтруются звуковые волны и учитывается зависимость плотности от давления на крупных масштабах, описывающая эффекты статической сжимаемости по сравнению со случаем несжимаемой плазмы. Полученная система нетривиальным образом зависит от отношения характерного вертикального масштаба течения и масштаба высот, на котором вариация плотности становится существенной. В отличие от магнитогидродинамических уравнений мелкой воды для несжимаемой плазмы, высота свободной поверхности не является определяющей характеристикой для описания течений, так как закон сохранения массы записывается через новую переменную, которая зависит от плотности плазмы и высоты столба. Полученная система имеет широкий спектр применения для описания астрофизической плазмы, поэтому в работе приведен анализ пределов применимости данного приближения. Динамика течений, описываемых полученной системой в случаях, когда характерная плотностная высота много меньше характерной высоты слоя, существенно отличается от случая, описываемого системой магнитогидродинамических уравнений несжимаемой жидкости мелкой воды, вследствие различия выражений для скорости распространения слабых возмущений и того, что в качестве эквивалента массы в полных магнитогидродинамических уравнений используется переменная, нетривиально связанная с высотой слоя.

В работе получены дисперсионные соотношения для линейных волн магнито-Пуанкаре, магнитострофических волн, волн Россби во внешнем вертикальном магнитном поле и волн Россби в горизонтальном магнитном поле с учетом сжимаемости плазмы. Проведен качественный анализ дисперсионных соотношений линейных волн, и сделаны выводы о возможности трехволновых взаимодействий для каждого типа волн в сжимаемой плазме. Методом многомасштабных разложений получены уравнения трехволновых взаимодействий для всех случаев волновых синхронизмов. Для каждого случая исследованы параметрические неустойчивости, проведено сравнение с несжимаемой плазмой.

Литература

1. *McIntosh, S.W., Cramer, W.J., Marcano, M.P., & Leamon, R.J.* The detection of Rossby-like waves on the Sun // Nature Astronomy. 2017. 1(4). P. 0086.
2. *Löptien, Björn, Laurent Gizon, Aaron C. Birch, Jesper Schou, Bastian Proxauf, Thomas L. Duvall, Richard S. Bogart, and Ulrich R. Christensen.* Global-scale equatorial Rossby waves as an essential component of solar internal dynamics // Nature Astronomy. 2018. 1.
3. *Климачков Д.А., Петросян А.С.* Нелинейная теория магнитогидродинамических течений сжимаемой жидкости в приближении мелкой воды // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. Вып. 3. С. 602.
4. *Климачков Д.А., Петросян А.С.* Крупномасштабная сжимаемость во вращающихся течениях астрофизической плазмы в приближении мелкой воды // ЖЭТФ. 2018. Т. 154, Вып. 6(12).

УДК 551.521.14

Изучение влияния облачности на радиационный баланс Земли по данным спутниковых измерений

Я.В. Суркова, М.Ю. Червяков, А.А. Спиряхина

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Измерение составляющих радиационного баланса Земли – прямой солнечной радиации, отраженной коротковолновой и уходящей длинноволновой радиации, представляет большой интерес для изучения Земной климатической системы. Наиболее детальные данные о глобальных распределениях этих характеристик могут быть получены по измерениям с борта искусственных спутников Земли [1].

Разработка космической аппаратуры для измерения составляющих радиационного баланса Земли проводилась в Саратовском государственном университете на протяжении многих лет под руководством профессора Ю.А. Склярова [2]. 16 сентября 2009 г. на орбиту был выведен ИСЗ «Метеор-М» № 1, а 8 августа 2014 г. был запущен «Метеор-М» № 2. На этих ИСЗ успешно работают радиометры ИКОР-М, измеряющие потоки коротковолновой отражённой солнечной радиации, в диапазоне 0,3–4,0 мкм.

Первый радиометр проработал на борту ИСЗ «Метеор-М» № 1 в течение пяти лет до сентября 2014 г. Результаты работы первого прибора опубликованы в работах [3–8]. Аналогичный радиометр ИКОР-М установлен на борту ИСЗ «Метеор-М» № 2. В августе 2014 г. оба измерителя проработали вместе, что позволило найти связь шкал измерителей на этих спутниках при сравнении карт глобального распределения среднемесячных значений альбедо.

В работе приведены результаты расчетов широтного распределения альбедо для Атлантического, Тихого и Индийского океанов [9]. Для этих целей в программе редактирования и анализа полей для ИКОР «IKOR Fields Editor» [10] были созданы шаблоны для расчета среднезональных составляющих радиационного баланса Земли для данных океанов.

Облачность является одним из наиболее важных факторов изменчивости радиационного режима Земной климатической системы, облака оказывают существенное воздействие на формирование климата. В работе оценена взаимосвязь широтного хода альбедо с широтным ходом облачности над Атлантическим (рис. 1) и Тихим океанами [11]. Значения облачной фракции были сняты со среднемесячных карт глобального распределения облачного покрова на сайте NASA Earth Observations. В ходе сравнения распределений облачности и альбедо было выявлено наличие корреляции для каждого океана. Коэффициент корреляции в 2015 году для Атлантического океана составляет 0,81, для западной части Тихого океана – 0,90, для восточной – 0,87. Минимальные величины для Атлантического океана: альбедо до 20 % и величина облачности 0,3–0,4. Максимальное альбедо в том же регионе 25–40 % и облачность 0,8–1.

Также было рассмотрено распределение альбедо в тропических циклонах. Для этих целей на спутниковых снимках видимого диапазона были выявлены циклонические вихри, а в программе для ИКОР «IKOR Archive Viewer» были найдены витки спутника в момент прохождения тропических циклонов (рис. 2). Для анализа был выбран циклон Dumazile, проходивший над Индийским океаном 5 марта 2018 года. Максимальная величина альбедо в тропическом циклоне Dumazile составляет 55 %, а в ближайших зонах вокруг него 10–20 %. Такое высокое значение альбедо объясняется тем, что в циклонах развивается мощная кучево-дождевая облачность.

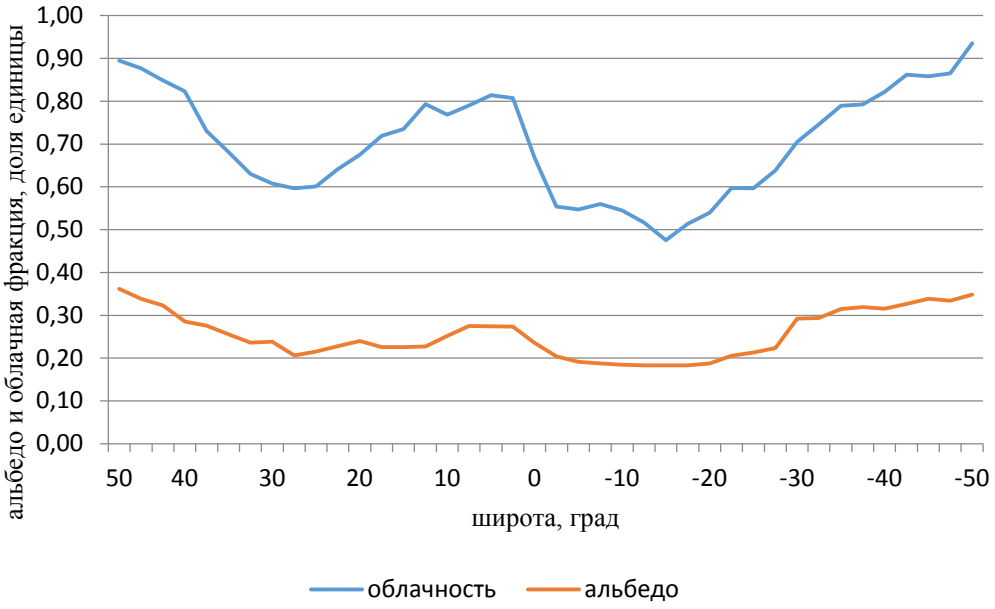


Рис. 1. Среднегодовой ход облачности и альбедо над Атлантическим океаном за 2016 год

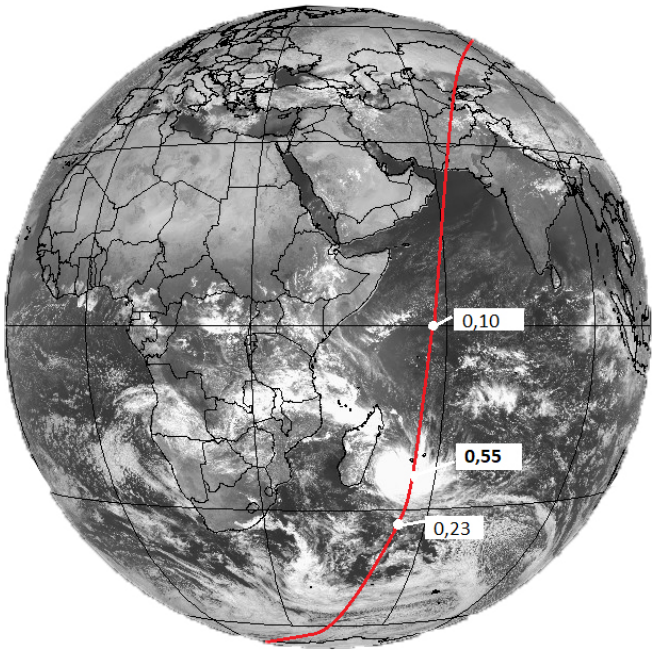


Рис. 2. Спутниковый снимок тропического циклона Dumazile 5 марта 2018 года

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16 35-00284 мол_

Литература

1. *Червяков, М.Ю.* Пространственно-временные вариации альбедо и поглощённой солнечной радиации и реакция земной климатической системы.: дис. ... канд. географ. наук / М.Ю. Червяков. Саратов, 2015. 146 с.
2. *Скляров Ю.А., Червяков М.Ю., Котума А.И.* Лаборатория исследования составляющих радиационного баланса Земли Саратовского государственного университета / География в Саратовском университете. Современные исследования: сб. науч. тр. / под ред. А.Н. Чумаченко. - Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2014. С. 166–172.

3. *Богданов М.Б., Воробьев В.А., Котума А.И., Червяков М.Ю.* Связь шкал измерителей коротковолновой отраженной радиации ИКОР-М ИСЗ "Метеор-М" № 1 и № 2 // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2016. Т. 13. № 4. С. 252–260.
4. *Скляров Ю.А., Воробьёв В.А., Котума А.И., Червяков М.Ю., Фейгин В.М.* Алгоритм обработки данных наблюдений уходящей коротковолновой радиации с ИСЗ "Метеор-М" № 1 // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2012. Т. 9. № 3. С. 83–90.
5. *Скляров Ю.А., Воробьёв В.А., Котума А.И., Червяков М.Ю., Фейгин В.М.* Измерения компонентов радиационного баланса Земли с ИСЗ "Метеор-М" № 1. Аппаратура ИКОР-М // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2012. Т. 9. № 2. С. 173–180.
6. *Скляров Ю.А., Червяков М.Ю., Воробьёв В.А., Котума А.И., Фейгин В.М.* Некоторые результаты обработки данных поглощённой солнечной радиации и альбедо, полученных с помощью аппаратуры ИКОР-М // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Науки о Земле. 2013. Вып. 2. Т. 13. С. 30–33
7. *Скляров Ю.А., Червяков М.Ю., Воробьёв В.А., Котума А.И., Фейгин В.М.* Особенности распределения альбедо в 2010 – 2012 годах по данным с ИСЗ «Метеор – М» № 1 // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2013. Т. 10. № 4. С. 107–117.
8. *Скляров Ю.А., Червяков М.Ю., Воробьёв В.А., Котума А.И., Фейгин В.М.* Особенности распределения поглощённой солнечной радиации в 2010 – 2012 годах по данным с ИСЗ «Метеор – М» № 1 // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2013. Т. 10. № 2. С. 272–283.
9. *Суркова Я.В., Червяков М.Ю.* Альбедо и поглощенная солнечная радиация на верхней границе атмосферы над Мировым океаном по данным спутниковых измерений // Комплексные исследования Мирового океана. Материалы II Всероссийской научной конференции молодых ученых, г. Москва, 10-14 апреля 2017 г. [Электронный ресурс]. – Москва: ИО РАН. С. 275–276.
10. *Котума А.И., Скляров Ю.А., Червяков М.Ю.* Программа редактирования и анализа полей для ИКОР «IKOR Fields Editor». Свидетельство о государственной регистрации программы ЭВМ № 2013618768 от 17 сентября 2013 года.
11. *Червяков М.Ю., Котума А.И., Богданов М.Б., Суркова Я.В., Спиряхина А.А., Кулькова Е.В., Шишкина Е.В., Шаркова С.А., Нейштадт Я.А.* Спутниковый мониторинг альбедо и поглощенной солнечной радиации на верхней границе атмосферы с помощью российских радиометров ИКОР-М // Сборник тезисов докладов Пятнадцатой Всероссийской открытой конференции "Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса". Москва, ИКИ РАН, 13-17 ноября 2017 г. М.: ИКИ РАН, 2017. С. 225.

УДК 524.354.4-327

Распространение волн в магнитосфере миллисекундных радиопульсаров с использование реалистичных магнитных полей

А.Л. Акопян[1], В.С. Бескин[2,3], А.К. Галишникова[2], Е.М. Новоселов[2], А.А. Филиппов[4]

[1]Принстонский университет
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
[4]Университет Беркли

Численная теория распространения радиоволн [1, 2] на основе известного подхода, развитого в монографии Кравцова и Орлова, позволяет описать общие свойства средних профилей, такие как позиционный угол линейной поляризации и круговую поляризацию для реальной структуры магнитного поля в магнитосфере пульсара. Основным теоретическим предсказанием является соотношение знаков круговой поляризации и производной позиционного угла относительно фазы пульсара, d$p.a.$/dφ: для X-моды знаки должны быть одинаковыми, а для O-моды – противоположными. В большинстве случаев это дает возможность распознать ортогональную моду, обыкновенную или необыкновенную, играющую основную роль в формировании среднего профиля.

Симуляции на основе такого подхода позволяют скомпенсировать недостатки модели полого конуса и учесть следующие эффекты: аберрацию обыкновенной моды, циклотронное поглощение вблизи светового цилиндра и эффект предельной поляризации, существенный при переходе из области с высокой концентрации плазмы, где верно приближение геометрической оптики, в область с низкой концентрацией. Характерное расстояние — радиус выхода r_{esc}, после которого поляризационные характеристики перестают зависеть от расстояния r от нейтронной звезды:

$$r_{esc} \sim 10^3 R \cdot \lambda_4^{2/5} \nu_{GHz}^{-2/5}. \quad (1)$$

Здесь $\lambda_4 = n_e/n_{GJ}$ (в единицах 10^4) – т.н. параметр множественности рождения.

Так же существенно отличие магнитного поля от дипольного, так как это простое невозмущенное решение справедливо только на близких к нейтронной звезде расстояниях. Работы [1,2] основаны на аналитическом приближении магнитного поля вращающимся дипольным с монопольным, которое играет роль на далёких от звезды расстояниях. В данной работе используется реалистичное поле, вычисленное на основе метода Particle-In-Cell, что позволяет учитывать реальную структуру магнитосферы миллисекундного пульсара (рис. 1).

В работе учтены плотность плазмы, дрейф частиц в электромагнитном поле, реалистичная функция распределения плазмы и реалистичные параметры для миллисекундных пульсаров: период, величина магнитного поля на поверхности звезды, множественность рождения, гамма-фактор, высота формирования излучения.

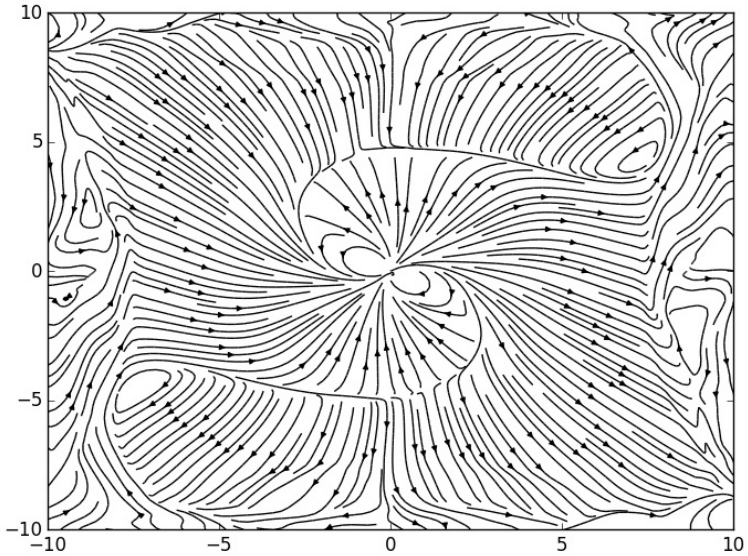


Рис. 1. Particle-In-Cell симуляция магнитного поля нейтронной звезды

Литература

1. *Beskin V.S., Philippov A.A.* On the mean profile of radio pulsars – I. Theory of propagation effects // MNRAS, 2012, V. 425, I. 2, P. 814–840.
2. *Hakobyan H.L., Beskin V.S. and Philippov A.A.* On the mean profiles of radio pulsars - II. Reconstruction of complex pulsar light curves and other new propagation effects // MNRAS, 2012, V. 469, I. 3, P. 2704–2719.

УДК 533.9.01

Волны Россби в магнитной гидродинамике стратифицированной плазмы в приближении двуслойной мелкой воды

***М.А. Федотова*[1,2], *Д.А. Климачков*[2], *А.С. Петросян*[1,2]**

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

В работе изучаются волны магнито-Россби во вращающейся несжимаемой плазме в приближении двуслойной мелкой воды. Такие волны определяют крупномасштабную динамику солнца и звезд, динамику магнитоактивных атмосфер экзопланет, захваченных приливами от несущей звезды, течения в аккреционных дисках нейтронных звезд.

Получены магнитогидродинамические уравнения двуслойной мелкой воды, основанные на усреднении классических (МГД) уравнений по высотам h_1 и Δh для двух слоев с плотностями ρ_1 и ρ_2 соответственно. Уравнения обобщены на случай нахождения плазмы во внешнем вертикальном магнитном поле.

Система МГД-уравнений двуслойной мелкой воды при наличии внешнего вертикального

поля, имеет вид для нижнего слоя:

$$\begin{cases} \partial_t h_1 + \partial_x(h_1 u_{x1}) + \partial_y(h_1 u_{y1}) = 0, \\ \partial_t(h_1 u_{x1}) + \partial_x(h_1 u_{x1}^2 - h_1 B_{x1}^2 + \frac{g h_1^2}{2}) + \frac{\rho_2}{\rho_1} g h_1 \partial_x(h_2 - h_1) + \partial_y(h_1 u_{x1} u_{y1} - h_1 B_{x1} B_{y1}) - B_0 B_{x1} = h_1 f u_{y1}, \\ \partial_t(h_1 u_{y1}) + \partial_x(h_1 u_{x1} u_{y1} - h_1 B_{x1} B_{y1}) + \partial_y(h_1 u_{y1}^2 - h_1 B_{y1}^2 + \frac{g h_1^2}{2}) + \frac{\rho_2}{\rho_1} g h_1 \partial_y(h_2 - h_1) - B_0 B_{y1} = -h_1 f u_{x1}, \\ \partial_t(h_1 B_{x1}) + \partial_y(h_1 B_{x1} u_{y1} - h_1 B_{y1} u_{x1}) - B_0 u_{x1} = 0, \\ \partial_t(h_1 B_{y1}) + \partial_x(h_1 B_{y1} u_{x1} - h_1 B_{x1} u_{y1}) - B_0 u_{y1} = 0, \\ \partial_t B_{z1} + B_0 div \vec{u}_1 = 0, \end{cases}$$

где h_1 – высота нижнего слоя, $h_2 = \Delta h + h_1$, Δh – высота верхнего слоя, u_{x1}, u_{y1} – горизонтальные компоненты скорости в нижнем слое, B_{x1}, B_{y1} – горизонтальные компоненты магнитного поля в нижнем слое, B_{z1} – вертикальная компонента магнитного поля в нижнем слое, B_0 – величина внешнего вертикального магнитного поля, ρ_1 – плотность нижнего слоя, ρ_2 – плотность верхнего слоя, f – параметрКориолиса.

Для верхнего слоя:

$$\begin{cases} \partial_t(\Delta h) + \partial_x((\Delta h) u_{x2}) + \partial_y((\Delta h) u_{y2}) = 0, \\ \partial_t(\Delta h u_{x2}) + \partial_x(\Delta h(u_{x2}^2 - B_{x2}^2) + \frac{g(\Delta h)^2}{2}) + g\Delta h \partial_x h_1 + \partial_y \Delta h(u_{x2} u_{y2} - B_{x2} B_{y2}) - B_0 B_{x2} = \Delta h f u_{y2}, \\ \partial_t(\Delta h u_{y2}) + \partial_x \Delta h(u_{x2} u_{y2} - B_{x2} B_{y2}) + \partial_y(\Delta h(u_{y2}^2 - B_{y2}^2) + \frac{g(\Delta h)^2}{2}) + g\Delta h \partial_y h_1 - B_0 B_{y2} = -\Delta h f u_{x2}, \\ \partial_t((\Delta h) B_{x2}) + \partial_y(\Delta h)(B_{x2} u_{y2} - B_{y2} u_{x2}) - B_0 u_{x2} = 0, \\ \partial_t((\Delta h) B_{y2}) + \partial_x(\Delta h)(B_{y2} u_{x2} - B_{x2} u_{y2}) - B_0 u_{y2} = 0, \\ \partial_t B_{z2} + B_0 div \vec{u}_2 = 0, \end{cases}$$

где h_1 – высота нижнего слоя, Δh – высота верхнего слоя, u_{x2}, u_{y2} – горизонтальные компоненты скорости в верхнем слое, B_{x2}, B_{y2} – горизонтальные компоненты магнитного поля в верхнем слое, B_{z1} – вертикальная компонента магнитного поля в верхнем слое, B_0 – величина внешнего вертикального магнитного поля, f – параметр Кориолиса.

Рассматриваются два типа течений: во внешнем магнитном поле и при наличии горизонтального магнитного поля. Для каждого случая найдены решения дисперсионного уравнения при равных плотностях слоев, а также поправки к решениям, связанные с различием в плотностях двух слоев. Отмечено, что при отсутствии внешнего поля и равенстве высот и плотностей слоев (или занулению высоты нижнего слоя h_1), мы приходим к известным МГД уравнениям мелкой воды. Для каждого типа течений показано, что в отсутствие магнитного поля и равенстве плотностей решением является ГД-волна Россби. Для этих решений также найдены поправки, связанные с различием в плотностях слоев.

Приведем здесь полученное дисперсионное соотношение в общем виде:

$$(\omega^4 + b_1\omega^2 - c_1\omega + d_1)(\omega^4 + b_2\omega^2 - c_2\omega + d_2) = \frac{\rho_2}{\rho_1} g^2 k^4 h_{01} \Delta h_0 (\omega^2 + a\omega + q_1)(\omega^2 + a\omega + q_2),$$

где при наличии внешнего поля:

$$b_1 = \frac{2B_0^2}{h_{01}^2} - f_0^2 - gk^2 h_{01};\ b_2 = \frac{2B_0^2}{\Delta h_0^2} - f_0^2 - gk^2 \Delta h_0;\ c_1 = \beta g k_x h_{01};\ c_2 = \beta g k_x \Delta h_0,$$

$$d_1 = \frac{B_0^4}{h_{01}^4} - \frac{B_0^2 g k^2}{h_{01}};\ d_1 = \frac{B_0^4}{\Delta h_0^4} - \frac{B_0^2 g k^2}{\Delta h_0};\ a = \frac{\beta k_x}{k^2};\ q_1 = \frac{B_0^2}{h_{01}^2};\ q_2 = \frac{B_0^2}{\Delta h_0^2},$$

а в отсутствие внешнего вертикального магнитного поля, при наличии горизонтального поля:

$$b_1 = -(f_0^2 + 2(k;B)_1^2 + gk^2 h_{01});\ b_2 = -(f_0^2 + 2(k;B)_2^2 + gk^2 \Delta h_0);\ c_1 = g h_{01} \beta k_x;\ c_2 = g \Delta h_0 \beta k_x,$$

$d_1 = (k;B)_1^2((k;B)_1^2 + gk^2h_{01})$; $d_2 = (k;B)_2^2((k;B)_2^2 + gk^2\Delta h_0)$; $a = \frac{\beta k_x}{k^2}$; $q_1 = -(k;B)_1^2$; $q_2 = -(k;B)_2^2$.

Развита нелинейная теория волн Россби в магнитном поле. Асимптотическим методом многомасштабных разложений выведены нелинейные уравнения взаимодействия для медленно меняющихся амплитуд, описывающиее трехволновые взаимодействия в вертикальном внешнем магнитном поле и в горизонтальном магнитном поле. Для каждого из рассматриваемых случаев показано существование распадных неустойчивостей и механизм параметрического усиления волн. Найдены инкременты неустойчивости и коэффициенты параметрического усиления.

УДК 537.84

Аналитическая теория сдвиговой турбулентности в космической плазме

***С.И. Сафонов*[2], *А.С. Петросян*[1,2]**

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

Работа посвящена исследованию характеристик турбулентного течения астрофизической плазмы в приближении магнитной гидродинамики методом быстрых искажений. Теория быстрых искажений турбулентности является методом линейного анализа турбулентных течений, изменяющихся под действием крупномасштабных градиентов скорости потока и внешнего магнитного поля. Основное предположение этой теории состоит в том, что поле турбулентности реагирует на некоторый внешний эффект настолько быстро, что инерция и силы вязкости, действующие на течение, приводят лишь к незначительным изменениям поля скорости течения. Таким образом, предполагается, что реакция на этот внешний эффект происходит в интервале времени малом по сравнению со временем вырождения турбулентности. Это делает задачу линейной и позволяет записать замкнутые линейные уравнения для флуктуаций поля скорости и магнитного поля, оставив только слагаемые, описывающие воздействие среднего поля на турбулентность. В работе метод быстрых искажений применяется для несжимаемых однородных течений астрофизической плазмы при наличии внешнего магнитного поля и крупномасштабного сдвига скорости. Получена замкнутая система уравнений, позволяющая по известным начальным характеристикам турбулентного течения рассчитать корреляции флуктуирующих компонент магнитного поля и поля скорости для любого момента времени.

$$\begin{cases} \dfrac{du_i'}{dt} = -\left(\delta_{ij} - \dfrac{2\chi_i\chi_j}{\chi^2}\right)S_{nl}u_l' + i\chi_l B_l b_i' - \nu\chi^2 u_i', \\ \dfrac{db_i'}{dt} = S_{il}b_l' + i\chi_l B_l u_i' - \eta\chi^2 b_i', \end{cases}$$

где u, b – флуктуирующие компоненты скорости течения и магнитного поля, $S_{ij} = \dfrac{\partial U_i}{\partial x_j}$ – линейный сдвиг скорости, $\boldsymbol{B}$ – внешнее магнитное поле, $\dfrac{d\chi_i}{dt} = -S_{ji}\chi_j$.

В работе рассматривается случай сдвигового среднего течения $\boldsymbol{U} = \{Sx_2,\ 0,\ 0\}$ и внешнего магнитного поля $\boldsymbol{B} = \{0,\ 0,\ B\}$. Исследуется эволюция спектральных корреляционных и структурных характеристик и переход к анизотропии изначально изотропной турбулентности. Аналитически получены решения уравнений для флуктуаций в приближении трехмерной двухкомпонентной турбулентности. В случае независимости по оси $x_1\,(k_1 = 0)$ решения имеют вид

$$u_i(\beta) = u_{i0}\cos(\gamma\beta\ \sin\phi) + i\,b_{i0}\sin(\gamma\beta\sin\phi) - \delta_{i1}\frac{1}{\gamma\sin\phi}u_{20}\sin(\gamma\beta\sin\phi)$$

$$b_i(\beta) = b_{i0}\cos(\gamma\beta\sin\phi) + i\,u_{i0}\sin(\gamma\beta\sin\phi) + \delta_{i1}\frac{1}{\gamma\sin\phi}b_{20}\sin(\gamma\beta\sin\phi)$$

где u_{i0}, b_{i0} – начальные поля флуктуаций поля скорости и магнитного поля, $\gamma = \frac{kB}{S}$, $\beta = St$ – безразмерное время, $\sin\phi = \frac{k_3}{k}$.

Литература

1. *Hunt J.C.R., Carruthers D.J.* Rapid distortion theory and the ‘problems’ of turbulence // J. Fluid Mech. 1990. V. 212, P. 497–532.
2. *Kassinos S.C., Reynolds W.C., Rogers M.M.* One-point turbulence structure tensors // J. Fluid Mech. 2001. V. 428. P. 13–248.

УДК 524.3-52

Исследование молодого массивного звёздного объекта G192.16-3.82

Н.С. Дмитриенко

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе изучается объект Хербига–Аро HH 397A и массивный молодой звёздный объект G192.16-3.82. В данной области присутствуют периодические направленные истечения, которые свидетельствуют об активной аккреции вещества возле молодой массивной звезды. В данной работе мы представляем результаты исследования как самой области, так и взаимодействия истечений с окружающей межзвёздной средой. Центральный источник истечений сильно погружен в межзвёздную среду, поэтому для исследования используются наблюдения в ближнем инфракрасном диапазоне (2 мкм). Наблюдательный материал был получен с использованием бинокулярного телескопа LBT (США).

Помимо фотометрических снимков с высоким разрешением (~ 0,2″) в узких фильтрах они содержат в себе спектры в диапазоне длин волн 2,1 – 2,25 мкм. В области можно заметить излучение в спектральных линиях молекулярного водорода (2,12 мкм, 2,22 мкм, 2,24 мкм) и Брэккет-гамма (2,16 мкм). Наблюдения проводились на приборе LUCI с использованием системы адаптивной оптики с искусственной (лазерной) звездой ARGOS для уменьшения влияния земной атмосферы. В совокупности с предыдущими исследованиями новые данные позволят дополнить информацию о физических условиях и процессах, происходящих в данной области звездообразования. В нашей работе мы представляем анализ наблюдательного материала и оценки темпа аккреции, а также выброса вещества из образующейся массивной звезды.

Литература

1. *Devine D.* [*et al.*]. A giant Herbig–Haro flow from a massive young star in G192.16 – 3.82 // The Astronomical Journal. 1999. V. 117 P. 2919–2930.
2. *Felli M.* [*et al.*]. Water maser variability over 20 years in a large sample of star-forming regions: the complete database // Astronomy & Astrophysics. 2007. V. 476. P. 373–664.

УДК 524.7-52

Ортогональные интеримпульсные радиопульсары — ключ к пониманию закона их эволюции

Е.М. Новоселов[1]***, В.С. Бескин***[1,2]***, А.К. Галишникова***[1]***, М.М. Рашковецкий***[2]

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

Пятьдесят лет интенсивных исследований радиопульсаров не принесли, однако, полной ясности в понимании природы ряда ключевых процессов, происходящих в магнитосфере нейтронной звезды. Мы до сих пор не знаем ни механизма когерентного радиоизлучения, ни реальную структуру электрических токов, ответственных за торможение нейтронных звезд. Для прояснения некоторых основных явлений мы покажем важность самого существования ортогональных пульсаров и покажем, как их популяция может продемонстрировать эволюцию угла наклона магнитной оси. Одной из основных задач при этом и изучении радиопульсаров в целом является определение области генерации плазмы в окрестности полярных шапок. Изучение проведено с использованием компьютерного моделирования. За основу взята модель Рудермана–Сазерленда, однако сделано уточнение, что гольдрайховская плотность заряда зависит от угла между магнитной осью и осью вращения (Тимохин, Хардинг, 2016). Также мы уточним стандартное условие генерации вторичной плазмы $H_{\rm RS} = R_0$, где R_0 – радиус полярной шапки, следующим: $H_{\rm RS} < R_{\rm min}$, где $R_{\rm min}$ – расстояние до ближайшей особенности (магнитного полюса, границы полярной шапки или же линии, на которой $\rho GJ = 0$). Ясно, что лишь при выполнении этого условия в области ускорения можно использовать одномерное приближение.

После получения геометрии областей рождения электронно-позитронной плазмы была определена критическая плотность по теоретической «линии смерти» пульсаров. Оценка была сделана в приближении двух моделей: магнитной гидродинамики и Бескина–Гуревича–Истомина (1993), в дальнейшем БГИ-модель.

После получения этих данных становится возможным изучение популяции ортогональных пульсаров. Для этого необходимо определить функцию видимости, так как становится очевидно, что ее геометрия более сложная, чем оценивалось ранее. Это позволит провести теоретический анализ количества интеримпульсных пульсаров в различных моделях и сравнить с наблюдательными данными. Также это поможет определить направление эволюции угла наклона магнитной оси радиопульсаров.

Таким образом, было показано, что статистический анализ ортогональных интеримпульсных пульсаров позволяет сформулировать тест, определяющий направление эволюции угла наклона осей χ При этом было показано, что хорошее согласие числа таких пульсаров с наблюдениями достигается лишь для модели БГИ; для модели МГД уточненная функция видимости ортогональных пульсаров приводит к слишком малому числу источников.

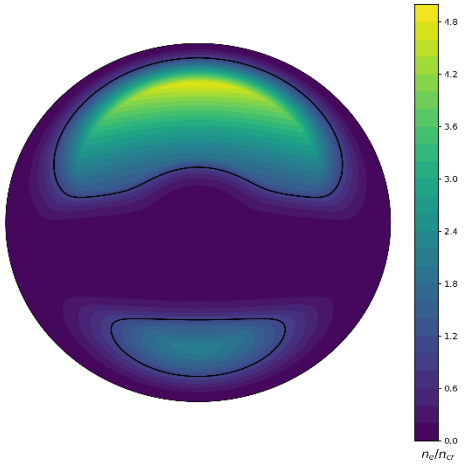


Рис. 1. Геометрия областей рождения вторичной электронно-позитронной плазмы. Угол наклона $\chi = 89^{o}$. Магнитное поле $B_{12} = 1{,}4$, период $P = 0{,}15$ с

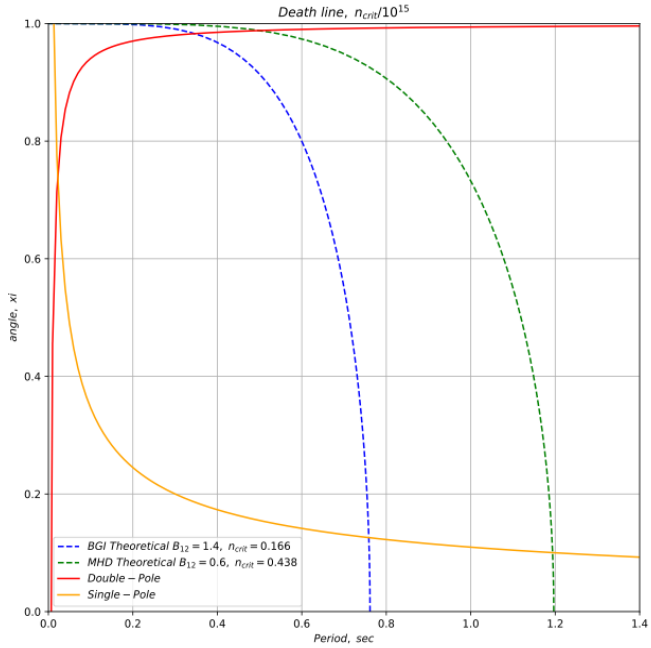


Рис. 2. Сравнение линий смерти для различных моделей и, соответственно различных медианных полей и соответствующим им критическим значениям плотности плазмы, после которой предполагается наличие излучения

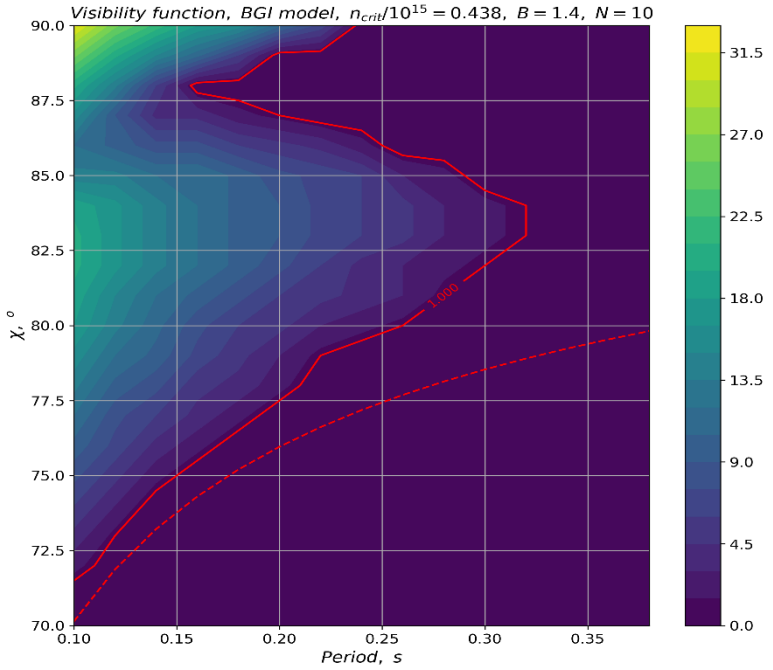


Рис. 3. Функция видимости интеримпульсных пульсаров в модели БГИ

Работа выполнена при поддержке гранта фонда РФФИ 17-02-00788

Литература

1. *Beskin V.S., Gurevich A.V., and Istomin Ya.N.* // Physics of the pulsar magnetosphere // Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993.
2. *Ruderman M.A. and Sutherland P.G.* // Astrophys, J. 196, 51, 1975.
3. *Timokhin A.N. and Arons J.* // MNRAS, 429, 20, 2010.

УДК 52-43

Широкополосный спектр рентгеновской двойной системы M33 X-6 по данным NuSTAR и Swift-XRT. Внегалактический источник Z-типа?

***С.М. Николаева*[1,2], *Р.А. Кривонос*[1], *С.Ю. Сазонов*[1]**

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

По данным телескопа XRT обсерватории Swift и телескопа НуСТАР впервые удалось построить рентгеновский спектр второго по яркости источника (X-6) галактики M33, в широком диапазоне энергий 0.3–20 кэВ. Спектр хорошо описывается моделью оптически и геометрически толстого аккреционного диска с максимальной температурой около 2 кэВ и внутренним радиусом около 5 км. Есть также указание на присутствие в спектре дополнительной жесткой компоненты. Болометрическая светимость M33 X-6 составляет около $2 \cdot 10^{38}$ эрг/с, при этом светимость в жестком диапазоне 10–20 кэВ составляет около 10% от полной. Все это указывает на то, что M33 X-6, вероятно, является источником Z-типа – рентгеновской двойной системой, в которой происходит околокритическая аккреция на слабозамагниченную нейтронную звезду. Объекты такого типа раньше исследовались практически исключительно в нашей Галактике.

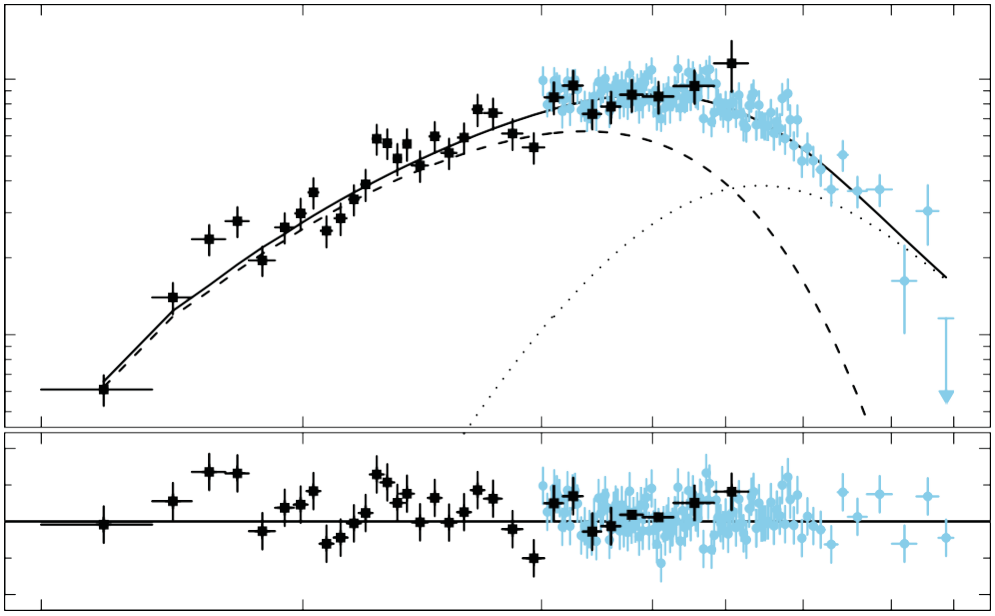


Рис. 1. Широкополосный спектр источника M33 X-6 по данным НуСТАР и Swift-XRT, изображенный синими кругами и черными квадратами соответственно. Аппроксимация моделью diskpbb + CompTT показана черной сплошной линией. Компоненты излучения, связанные с аккреционным диском и комптонизацией в горячей короне (в нашем случае, возможно, пограничном слое нейтронной звезды) показаны линиями из штрихов и точек соответственно. Верхние пределы соответствуют 2σ. На нижней панели показаны невязки данных относительно модели

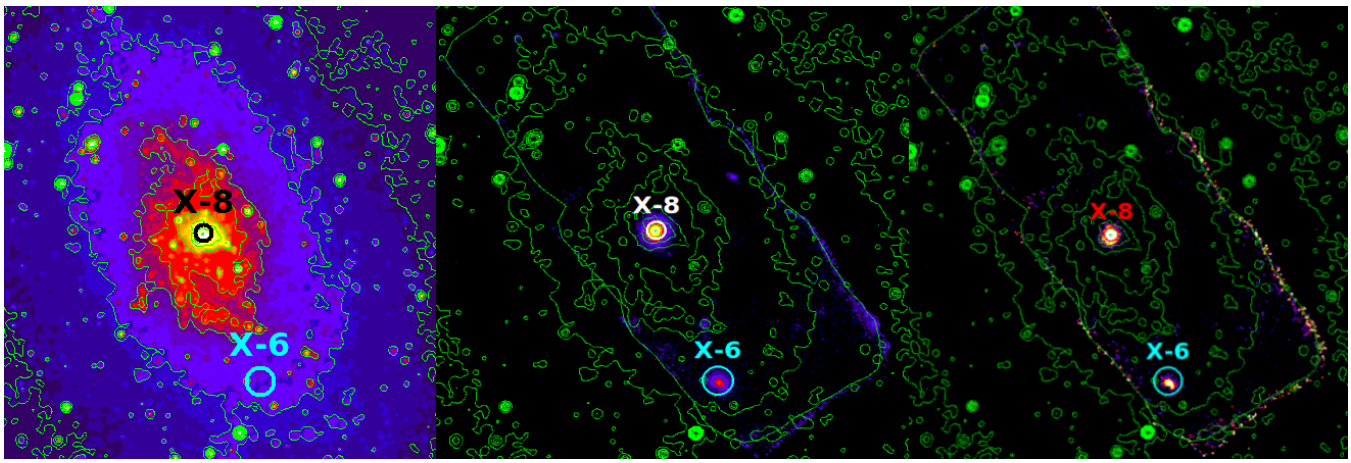


Рис. 2 Изображения галактики M33. Слева: WISE 4,6 мкм, Посередине: НуСТАР (3-79 кэВ), справа: НуСТАР (10–20 кэВ)

Литература

1. *Николаева С., Кривонос Р., Сазонов С.,* Широкополосный спектр рентгеновской двойной системы M33 X-6 по данным NuSTAR и Swift-XRT. Внегалактический источник Z-типа? // Письма в Астрономический журнал. 24 апреля 2018. ISSN 1063-7737. Т. 44. 10. С. 593–602. (принято к печати).

СЕКЦИЯ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Председатель: И.А. Щербаков (д.ф.-м.н., акад. РАН)

Зам. председателя: В.В. Глушков (д.ф.-м.н., доцент, заместитель директора по научной работе)

Секретарь: А.Н. Самарин (к.ф.-м.н.)

Дата: 20.11.2018

Время: 10:00-22:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 7, ауд. 106-107 БФК, МФТИ

УДК 543.51

Лазерная масс-спектрометрия биологических объектов для фармакологических и гистологических исследований

А.Б. Бухарина, А.В. Пенто, Р.С. Аблизен, С.М. Никифоров

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Гистология на сегодняшний день является основным способом идентификации патологических изменений в тканях. Методика подразумевает подготовку и окрашивание срезов исследуемой ткани. Процедура может занимать время вплоть до нескольких часов и вносит изменения в исходный химический состав исследуемого объекта, а анализ в значительной степени субъективен.

Разработан новый метод масс-спектрометрического анализа биологических объектов без предварительной подготовки в режиме реального времени при атмосферном давлении. Отсутствие предварительной подготовки позволяет сократить время анализа и максимально сохранить информацию об исходном химическом составе исследуемого объекта. Подход предполагает перевод пробы в газовую фазу путём абляции исследуемого объекта лазерным излучением. Ионизация продуктов абляции производится излучением лазерной плазмы, создаваемой на специальной металлической мишени вблизи области испарения. Затем образовавшиеся ионы попадают в масс-анализатор с газодинамическим вводом из области атмосферного давления. Схема эксперимента представлена на рис. 1. Метод позволяет анализировать газообразные, твёрдые и жидкие органические объекты, в том числе лекарственные препараты и биологические ткани. Проведена оценка порога обнаружения метода на примере анализа таблеток лекарственных препаратов. Показана возможность построения пространственной карты концентраций веществ в исследуемом образце с пространственным разрешением на уровне десятков мкм (пример построения масс-спектрометрических изображений приведен на рис. 2).

При классификации исследуемых объектов на основе их масс-спектрометров требуется выявлять отличительные комбинации масс-спектрометрических пиков. Для этого могут быть применены методы многомерной математической статистики, позволяющие существенно понизить размерность исходного набора данных (до двух или трех) и исключить субъективную оценку в дальнейшем анализе результатов эксперимента. На рис. 3 показан результат такого преобразования исходных масс-спектров исследованных модельных объектов – гистологических срезов тканей лабораторных мышей. Масс-спектры объектов различных типов преобразуются в точки в двумерном пространстве и группируются в хорошо разделяемые области, указывая на возможность идентификации типа ткани и обнаружения участков онкологической патологии.

Метод может быть применён как для проведения скрининговых фармакологических исследований, так и для анализа тканей непосредственно в процессе хирургического вмешательства в режиме реального времени.

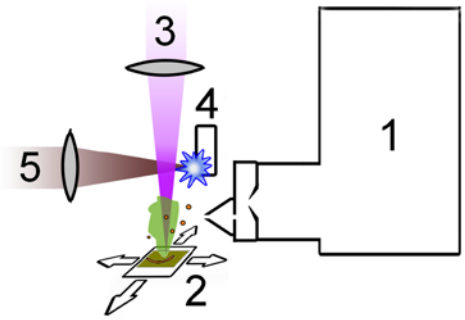


Рис. 5. Схема экспериментальной установки: 1 – масс-спектрометр, 2 – образец анализа на держателе образца, 3 – аблирующее излучение лазера, 4 – мишень с лазерной плазмой, 5 – зажигающее плазму лазерное излучение

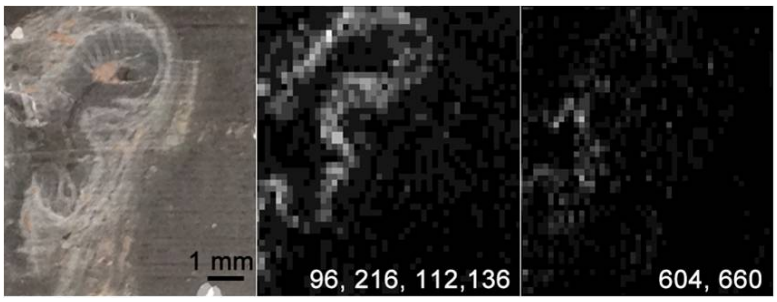


Рис. 6. Масс-спектрометрическое изображение гистологического среза ткани

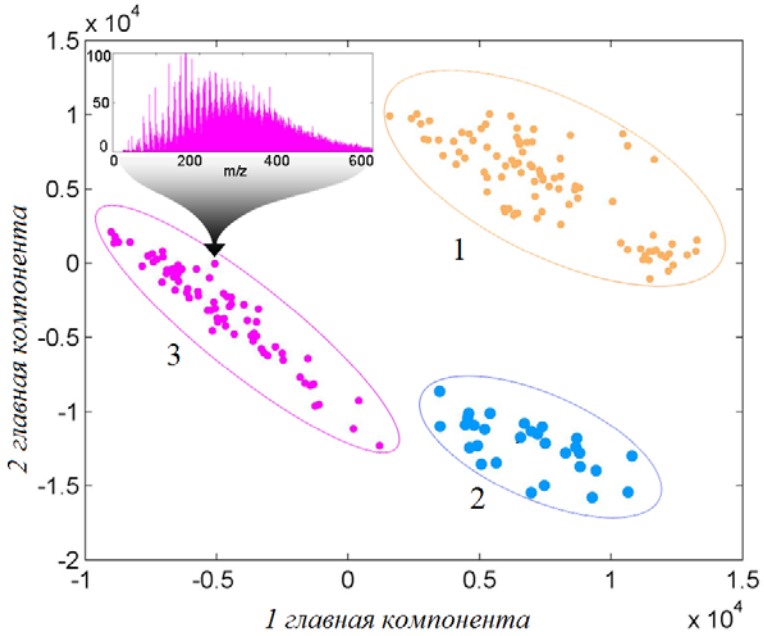


Рис. 7 Двумерная визуализация спектров полученных от разных тканей. 1 – ткань кишечника мыши без патологических изменений, 2 – пораженная ткань кишечника, 3 – мышечная ткань мыши

Литература

1. *Пенто А.В., Никифоров С.М., Симановский Я.О., Гречников А.А., Алимпиев С.С.* Лазерная абляция и ионизация излучением лазерной плазмы при атмосферном давлении в масс-спектрометрии органических соединений // Квантовая электроника. 2013. 43:1. 55–59
2. *Moshkunov, K.A., Alimpiev, S.S., Grechnikov, A.A., Nikifirov, S.M., Pento, A.V., & Simanovsky, Y.O.* (2014). Atmospheric pressure imaging mass spectrometry of drugs with various ablating lasers// Journal of physics:

Conference Series (V. 558, N 1, P. 012012). IOP Publishing.

УДК 535.62

Лазерная генерация удлинённых наночастиц при импульсном облучении золота в воде и водных растворах $CaCl_2$

***М.И. Жильникова*[1,2], *Е.В. Бармина*[2], *Г.А. Шафеев*[2,3], *А.В. Симакин*[2], *С.М. Придворова*[4], *О.В. Уваров*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[3] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[4]Институт биохимии имени А.Н. Баха РАН

Лазерная абляция твёрдых тел в жидкостях является одним из методов формирования микро- и нанообъектов [1, 2]. В настоящей работе впервые были экспериментально изучены одностадийная методика генерации удлинённых наночастиц золота и последующие процессы их фрагментации и агломерации. Образование удлинённых наночастиц золота происходило путём лазерной абляции твёрдой золотой мишени в воде. Для реализации данного процесса использовался волоконно-иттербиевый лазер с длительностью импульса 200 нс и частотой следования импульсов 20 кГц. В работе варьировалось два параметра: время лазерной экспозиции (от 0 до 60 мин), а также энергия в импульсе (0,5 и 1 мДж).

Исследование процесса взаимодействия лазерного излучения уже в отсутствие мишени осуществлялось при помощи установки, показанной на рис. 1. Она включала в себя F-Theta объектив с излучением волоконно-иттербиевого лазера, пару отражающих зеркал и кювету с ранее полученным коллоидным раствором наночастиц. В эксперименте прослеживалась динамика поведения наночастиц. При воздействии на коллоидный раствор лазерного излучения происходит агломерация удлинённых наночастиц. При дальнейшем облучении агрегация частиц сменяется их фрагментацией, т.е. увеличением доли малых сферических частиц. Изменения морфологии наночастиц золота подтверждается спектрами экстинкции коллоидного раствора и снимками с просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ). Как видно из рис. 2, пятиминутное лазерное облучение с энергией 1 мДж коллоидного раствора приводит к образованию крупных наночастиц (порядка100–150нм), связанных между собой цепочками наночастиц, длина которых доходит до 200 нм.

При помощи энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX) был получен химический состав воды, полученной при помощи обратного осмоса, которая была использована в упомянутых выше экспериментах. Анализ показал, что в преобладающем количестве в воде присутствует кальций. По предположению именно наличие кальция в воде способствуют образованию удлинённых наночастиц золота. Поэтому дальнейшие эксперименты по облучению золотой мишени методом лазерной абляции в жидкости проводились в воде, полученной посредством системы очистки Milli-Q, с различной концентрацией хлорида кальция ($CaCl_2$). Время облучения составляло 1 мин. В экспериментах концентрация хлорида кальция в растворах варьировалась от 1 до 100 мг/мл. Из рис. 3. видно, что при концентрации 0,1 мг/мл пик располагается на 520 нм, а при 1 мг/мл уже на 540 нм. Это смещение происходит за счёт увеличения показателя преломления вокруг наночастиц золота из-за наличия вокруг них оболочки из $Ca(OH)_2$, которая отображается на ПЭМ-снимках.

Как правило, вода, используемая в экспериментах по методу лазерной абляции, является либо чистой, либо может содержать в себе специально добавленные ионные примеси. Так, например, были проведены исследования по образованию наночастиц золота путём лазерной абляции в растворах хлорида натрия и хлорида калия [3], т.е. для катионов с одной валентностью. Особенностью наших экспериментов является использование добавки в виде хлорида кальция, т.е. двухвалентного катиона. Его присутствие в воде качественно влияет на динамику взаимодействия лазерного излучения и наночастиц золота.

На основе полученных экспериментальных данных была предложена теория, объясняющая процесс образования оболочки вокруг наночастиц.

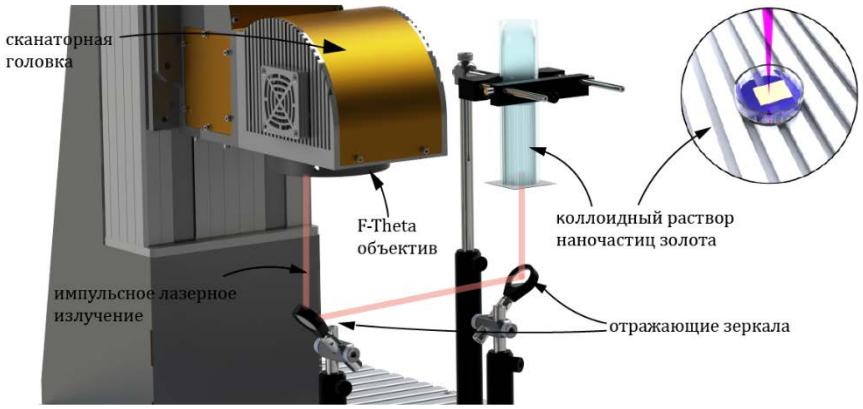


Рис. 1. Схема эксперимента по воздействию лазерного излучения на коллоидные растворы удлинённых наночастиц золота. Параметры лазера: длина волны излучения 1060–1070 нм, длительность импульса 200 нс, энергия в импульсе 1 мДж, частота следования импульсов 20 кГц, скорость сканирования 500мм/с

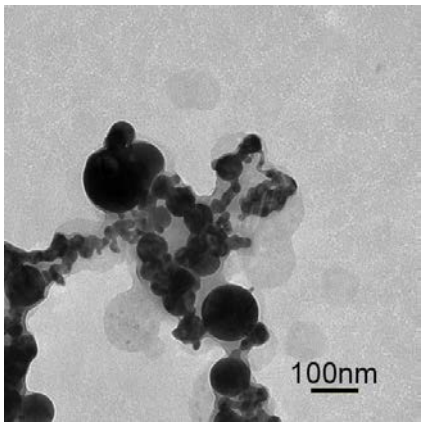


Рис. 2. ПЭМ-изображение наночастиц золота при облучении его коллоидного раствора при времени лазерной экспозиции 5 минут (*a*), энергия в импульсе 1 мДж

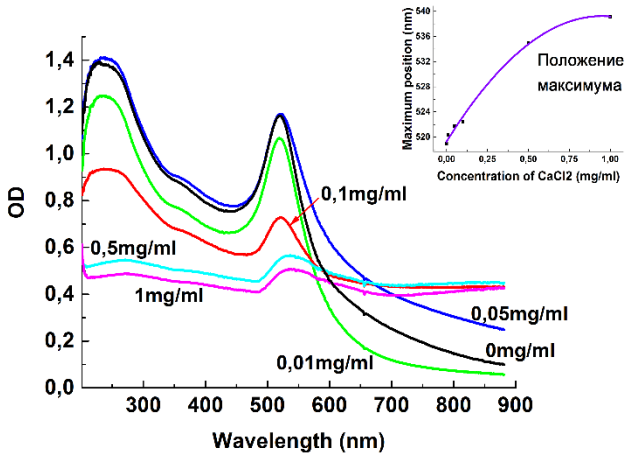


Рис. 3. Зависимость спектра экстинкции наночастиц золота от концентрации $CaCl_2$ в воде (Milli-Q). На вставке – положение пиков спектров экстинкции в зависимости от концентрации

Работа выполнена в рамках государственного задания АААА-А18-118021390190-1 и частично поддержана грантами РФФИ (16-02-01054 а), 18-52-70012 е Азия а, Программой Президиума РАН № 7 и грантом Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых (грант № МК-3606.2017.2).

Литература

1. *Nedersen J., Chumanov G., Cotton T.M.* Laser ablation of metals: a new method for preparing SERS active nanocolloids // Appl. Spectrosc. 1993.V. 47, N 12. P. 1959–1964.

2. *Kamat P.V., Flumiani M., Hartland G.V.* Picosecond dynamics of silver nanoclusters. Photoejection of electrons and fragmentation // The Journal of Physical Chemistry B. 1998. V.102, N 17. P. 3123–3128.
3. *Sylvestre J.P., Poulin S., Kabashin A.V., Sacher E., Meunier M., Luong J.H.* Surface chemistry of gold nanoparticles produced by laser ablation in aqueous media // The Journal of Physical Chemistry B. 2004. V. 108, N 43. P. 16864–16869.

УДК 544.032.6

Упрочнение сплава ЭП517-Ш при помощи импульсного лазера мощностью до 50 МВт под воздействием гидроудара

С.А. Никифоров, Горунов А.И., А.Н. Мухаметов, А.С. Лещева

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ

На настоящий момент уже накоплен богатый опыт и проведено достаточно большое количество исследований в области лазерной обработки сплавов.

В данном докладе описана структура жаропрочного никелевого сплава 15Х12Н2МВФАБ-Ш (ЭП517-Ш) после обработки импульсным лазером образца, находящегося под проточным течением жидкости (в данной статье используется вода). По ТУ 14-1-2902-80 и ТУ 14-1-1161-75 химический состав приведен для 15Х12Н2МВФАБ-Ш представлен в Таблице 1 [1].

Лазерная обработка поверхности сплава проводилась с помощью импульсного лазера (мощность светового потока 1,8 кВт, $\lambda = 1064$ нм, ширина пятна лазерного излучения 2 мм, время воздействия 10 нс). рис. 1.

Для анализа микроструктуры получаемых образцов использовался оптический микроскоп Axio Observer A1m Carl Zeiss с программным обеспечением Tixomet. Образцы перед анализом последовательно шлифовались набором алмазных шлифовальных дисков (220 grit, 500 grit) и полировались с использованием алмазных суспензий (9 мкм).

После упрочнения твердость поверхности возрастает $HV0,01 / HV$ исх. в 1,57 раза.

При этом упрочнение достигается за счет мощного гидроудара вызванного локальным разогревом поверхности образца погруженного в воду [2].

В настоящее время предпринимаются исследования обработки данного сплава тем же методом, но с использованием жидкостей большей вязкости.

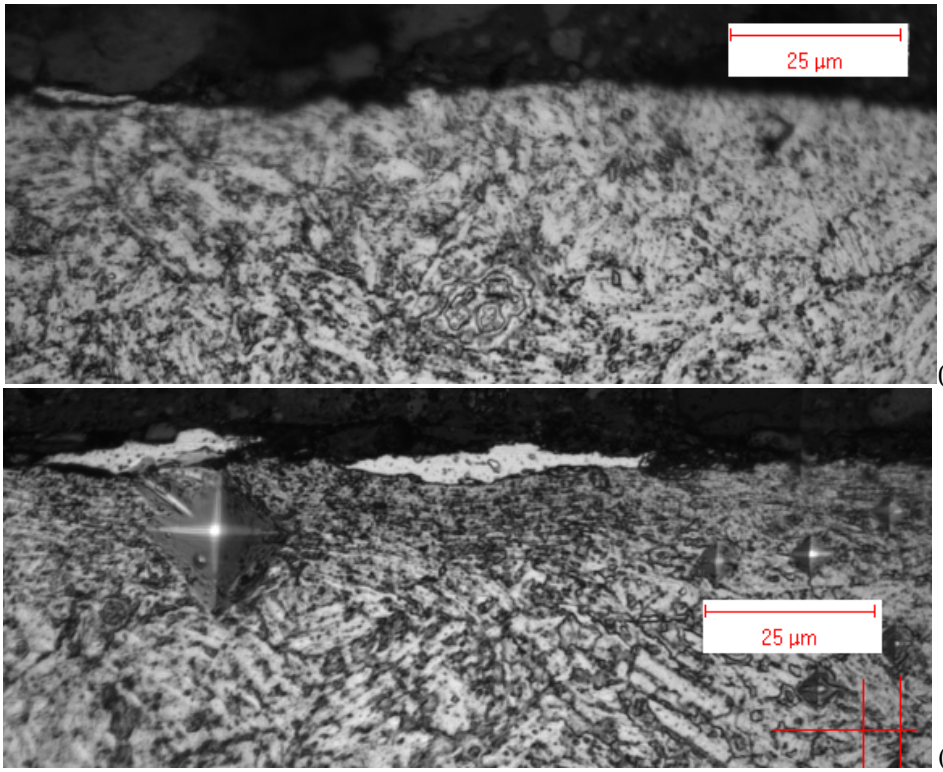
Таблица 1

Химический состав 15Х12Н2МВФАБ-Ш

C	**S**	**P**	**Mn**	**Cr**	**W**
≤0,13-0,18	≤0,015	≤0,030	≤0,50	11,00-12,50	0,65-1,00
V	**Si**	**Ni**	**Nb**	**N**	**Mo**
0,18-0,30	≤0,50	1,70-2,10	0,20-0,35	0,02-0,08	1,35-1,65



Рис. 1. Лазерный комплекс для генерации импульсов широкополосного лазерного излучения LQ 529 B (Солар Лазер Систем)



(а)

(б)

Рис. 2. Структура ЭП517-Ш до упрочнения (а) и после упрочнения импульсным лазером (б)

Литература

1. *Яресько С.И.* Физические и технологические основы упрочнения твердых сплавов. Самара: изд-во Самарского научного центра РАН, 2006. 244 с.
2. *Григорьянц А.Г., Шиганов И.Н., Мисюров А.И.* Технологические процессы лазерной обработки. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2006. 246 с.

УДК 544.032.6

Упрочнение никелевого жаропрочного сплава ХН73МБТЮ (ЭИ698ВД) мощным импульсным лазером

А.Н. Мухаметов, С.А. Никифоров, А.С. Лещева, А.И. Горунов

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ

Рассмотрены перспективные методы упрочнения и описаны новые способы обработки никелевых сплавов с применением лазерных технологий. Изучен метод для формирования упрочнённой структуры поверхности, мощным импульсным лазером жаропрочного никелевого сплава ХН73МБТЮ (ЭИ698ВД).

Метод упрочнения жаропрочного сплава ХН73МБТЮ, используемого для изготовления деталей авиационной техники (лопаток газовых турбин, термообработанных и обточеных штамповок дисков, дефлекторов, лабиринтов и носков), состоит из обработки импульсным лазером образца, находящегося под проточным течением жидкости (в данном случае используются вода и глицерин).

Химический состав материала ЭИ698ВД, соответствующий ГОСТ ТУ 14-1-2792-79, предоставлен в таблице 1.

Обработка мощным лазерным импульсом будет проведена с помощью лазерного комплекса LQ 529 B (Солар Лазер Систем) (мощность светового потока 1,8 кВт, длина волны равна 1064 нм, ширина пятна лазерного излучения 2 мм, время воздействия 10 нс) изображен на рис. 2. Поток воды будет выполнять роль преобразователя части энергии в механический импульс путем испарения материала и формирования плазмы. Также, вода будет служить эффективным охладителем. Данный эксперимент будет проведен повторно с помощью глицерина, который будет усиливать проходящую взрывную волну, формирующую зоны пластической деформации.

Из предыдущих работ для сплава ЭП517-Ш было показан эксперимент, из которого очевидно, что в верхнем слое обработанного образца наблюдается состояние поверхности, близкое к аморфному, твердость поверхности возрастает HV0.01/HVисх. в 1,57 раза. Данный метод упрочнения поверхности жаропрочного сплава ЭИ698ВД, позволит избежать затрат, связанных с ремонтом/заменой лопаток турбин, штамповок дисков, дефлекторов.

В настоящей работе был проведен эксперимент по поверхностному упрочнению сплава ЭИ698ВД в воздушной среде. После импульсного лазерного воздействия сформировался не травящийся слой (рис. 1). Предположительно, высокая скорость охлаждения способствовала формированию структуры близкой к аморфной [1]. При этом значения твердости схожи с исходной (рис. 2). Однако в дальнейших исследованиях планируется провести изучение структуры с помощью электронной микроскопии и элементного анализа. Наблюдается развитая дендритная структура в слое, граничащем с основным металлом.

Причиной формирования полос в области, прилегающей к области лазерного воздействия, является интенсивная пластическая деформация. Известно, что к образованию деформационных полос приводит движение зерна [2]. Ввиду того, что размер зерен составляет 50–500 мкм то и толщина упрощенного слоя может варьироваться в этих пределах.

Выводы: В данной статье показаны возможности импульсного лазера для управления структурой сплава ЭИ698ВД. Установлено, что при взаимодействии импульсного лазера с поверхностью образца происходит формирование белого, не травящегося слоя с глубиной до 20 мкм. Зона термического влияния составляет менее 5 мкм, что обеспечивается скоростным отводом тепла с поверхности.

Таблица 1

Химический состав ЭИ698ВД (в %)

Al	C	Cr	Fe	Mn	Mo
1,3-1,7	≤0,08	13,0-16,0	≤2,0	≤0,40	2,8-3,2
Nb	Ni	P	S	Si	Ti
1,8-2,2	Основа	≤0,015	≤0,007	≤0,60	2,35-2,75

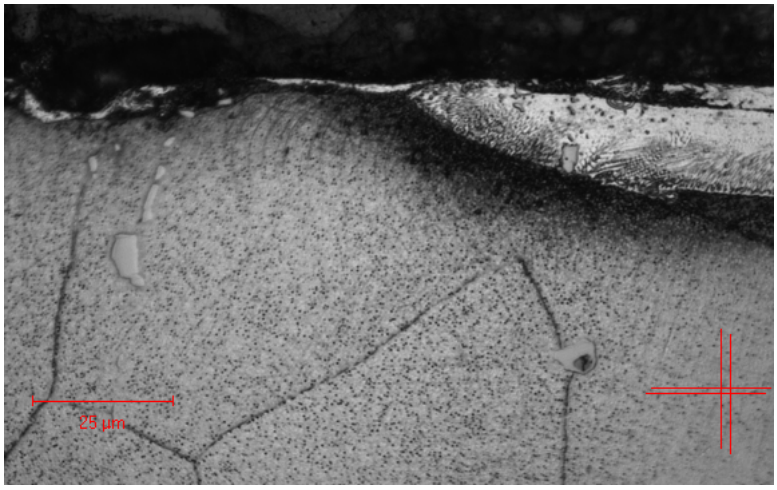


Рис. 1. Область образца подвергнута импульсной лазерной обработке

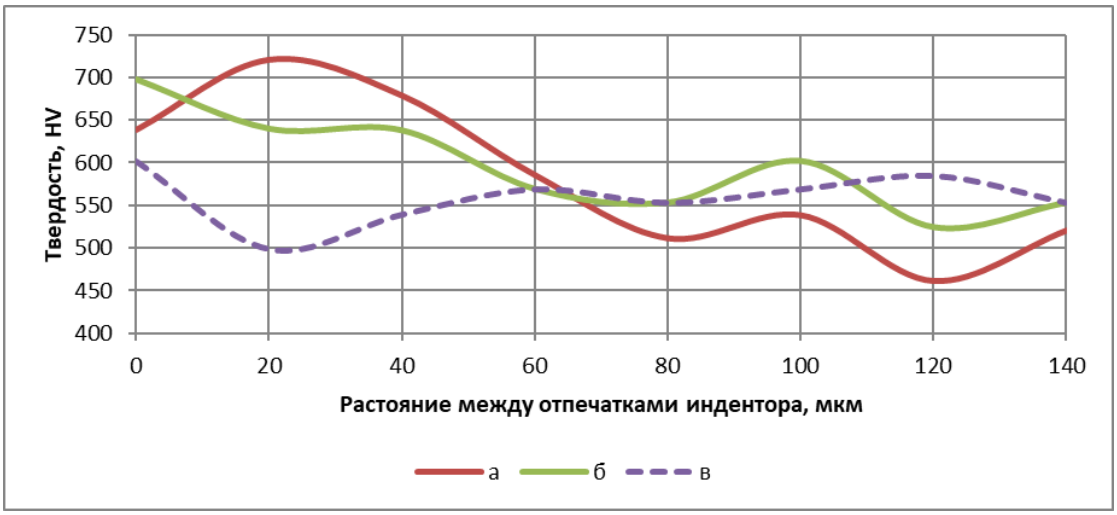


Рис. 2. График твердости в трех различных областях (а – зона термического воздействия, б – зона деформационных полос, в – исходный материал)

Литература

1. *Глезер А.М., Пермякова И.Е., Громов В.Е., Коваленко В.В.* Механическое поведение аморфных сплавов. Новокузнецк: изд-во СибГИУ, 2006. 416 с.
2. *Смирнов М.А.* Основы термической обработки стали: Учебное пособие М.: Наука и технологии, 2002. 519 с.

УДК 535.622.5

Анизотропия зарядового транспорта и магнитные фазовые переходы в антиферромагнетике HoB_{12}

***К.М. Красиков*[1], *В.В. Глушков*[1,2], *С.В. Демишев*[1,2], *В.Н. Краснорусский*[2], *Н.Ю. Шицевалова*[3], *В.Б. Филипов*[3], *А.Л. Хорошилов*[1,2], *Н.Е. Случанко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[3]Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины

Возникновение антиферромагнитного (АФ) порядка при низких температурах в додекабориде HoB_{12} вызвано РККИ взаимодействием (косвенный обмен) между ионами Но через

электроны проводимости. Приложение внешнего магнитного поля приводит в HoB_{12} к появлению большого количества различных магнитоупорядоченных фаз, обнаруженных ранее авторами [1]. Так как удельное сопротивление при этом в значительной степени определяется рассеянием электронов проводимости на магнитной структуре антиферромагнетика, то из анализа кривых магнетосопротивления можно сделать выводы о характере магнитных взаимодействий и магнитных фазовых переходах.

С целью выяснения природы магнитных фазовых переходов между АФ-фазами в работе в интервале температур T = (2,1–6,5) К методом вращения образца вокруг токового направления в магнитном поле до 80 кЭ были выполнены измерения поперечного магнетосопротивления монокристаллических образцов HoB_{12} высокого качества.

Полученные зависимости $\rho / \rho = f\left(H, \varphi\right)$ для направлений тока I через образец вдоль осей [001] и [110] приведены на рис. 1 (амплитуда магнетосопротивления показана цветом). Особенно явно анизотропия рассеяния и магнитные фазовые границы видны для $\boldsymbol{I} \parallel [110]$ (рис. 1b), т.к. при этом магнитное поле проходит через основные кристаллографические направления [001], [011] и [111].

На рис. 2 показана проекция магнетосопротивления на плоскость $\left(H, \varphi\right)$ для направления тока $\boldsymbol{I} \parallel [110]$ при T = 2,1 K, 6 K и 10 K, а также приведены границы магнитоупорядоченных фаз (см. панели a и b). Выше температуры Нееля $T_N \approx 7{,}3$ K (рис. 2c) антиферромагнитный порядок пропадает, однако и в парамагнитной фазе сохраняется анизотропия магнетосопротивления.

Детальный анализ кривых магнетосопротивления позволяет заключить, что различные магнитные фазы возникают преимущественно в окрестностях основных кристаллографических направлений. При интерпретации столь сложной магнитной фазовой диаграммы АФ-состояния и сильной анизотропии зарядового транспорта следует учесть, что в RB_{12} вдоль направления [110] образуются динамические зарядовые страйпы [2]. Появление таких проводящих каналов приводит к перенормировке магнитных взаимодействий в АФ-фазе, что и обуславливает столь сильную анизотропию магнетосопротивления и возникновение магнитоупорядоченных фаз в направлении вдоль ($\boldsymbol{H} \parallel [110]$) и поперек ($\boldsymbol{H} \parallel [001]$) страйпов. Поскольку образование проводящих каналов в редкоземельных додекаборидах $Ho_xLu_{1-x}B_{12}$ происходит при переходе в состояние каркасного стекла при $T^* \approx 60$ K [3], анизотропия зарядового транспорта сохраняется и в парамагнитной фазе.

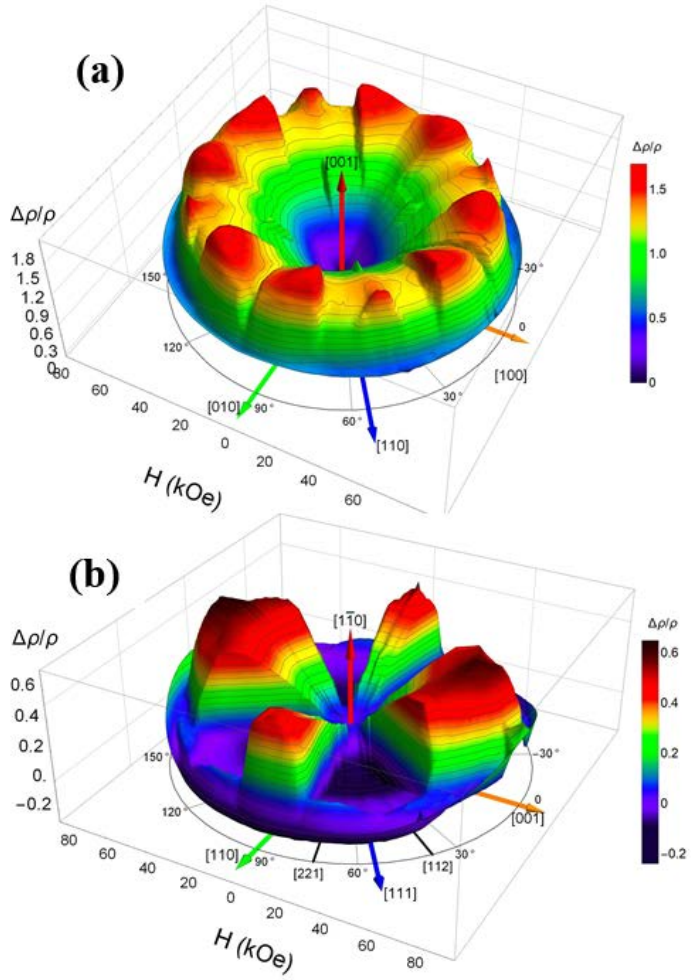


Рис. 1. Поперечное магнетосопротивление HoB_{12} для T = 2.1 K с токовым направлением $\boldsymbol{I}$ || [001] (a) и $\boldsymbol{I}$ || [110] (b) в координатах (H, φ)

УДК 548.75

Влияние примеси ионов титана на низкоэнергетическую динамику гексаферрита бария

***С.Р. Егиян*[1], *Л.Н. Алябьева*[1], *В.И. Торгашев*[2], *Д.А. Винник*[3], *С.А. Гудкова*[1,3], *А.С. Прохоров*[1,4], *М. Дрессель*[1,5], *Б.П. Горшунов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Южный Федеральный Университет
[3]Южно-Уральский государственный университет
[4]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[5]Physikalisches Institut, Universitat Stuttgart

Бариевыми гексаферритами М-типа называются соединения с химической формулой $BaFe_{12}O_{19}$. Указанные материалы на сегодняшний день активно используются в качестве постоянных магнитов в микроволновых приборах, в магниторезистивных датчиках, в радиочастотных фильтрах, а также в устройствах магнитной памяти [1]. Структурные особенности гексаферрита бария крайне чувствительны к катионным замещениям, помимо изменения функциональных характеристик, таких как коэффициент поглощения, намагниченность насыщения, коэрцитивная сила и т.д., в легированных составах могут проявляться свойства, не

характерные для чистых кристаллов, такие как дипольные релаксации либо квантовые критические явления. Подобная особенность позволяет получать составы, максимально отвечающие требованиям конкретного приложения, а изучение свойств определенного замещения становится крайне актуальной задачей.

Гексаферриты бария, $BaFe_{12}O_{19}$, представляют собой оптически непрозрачные кристаллы слоистой структуры. Ионы Fe^{3+} занимают пять различных позиций в кристаллической решетке: три в октаэдрах (2a, $4f_1$, 12k), одну в тетраэдре ($4f_2$) и одну в пятикоординационной бипирамиде (2b). Последняя позиция не стабильна: ион Fe^{3+} в бипирамиде может находиться в трех различных положениях динамически осциллируя вдоль оси *c* при температурах вплоть до 80 К [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 Ti^{4+} встраиваются только в три кристаллографические позиции: октаэдры $4f_1$, тетраэдры $4f_2$ и бипирамиды 2b в соотношении 2:2:1 [3].

В данной работе было проведено исследование кристаллов $BaTi_xFe_{12-x}O_{19}$ (x = 0,5, 0,6, 0,7, 1) методами терагерцовой и инфракрасной спектроскопии при температурах 5–300 К. 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 90 $см^{-1}$. Спектры отражения с разрешением 2 $см^{-1}$ в дальней и средней инфракрасной областях (50–8000 $см^{-1}$) выполнены с использованием стандартного инфракрасного фурье-спектрометра «Bruker Vertex 80v» с микроскопной приставкой «Hyperion 2000». Для исследования из монокристаллов с соответствующим содержанием титана были вырезаны плоскопараллельные пластинки толщинами порядка 100 мкм с кристаллографической осью *c,* лежащей в плоскости пластинки, что позволило провести оптические измерения в двух принципиальных поляризациях, при ориентации вектора электрического поля зондирующего излучения $E \perp c$ и $E \parallel c$ соответственно.

Было обнаружено, что низкоэнергетическая динамика исследованных соединений весьма чувствительна к поляризации зондирующего излучения. При поляризации $E \perp c$, на границе терагерцовой области обнаружены четкие признаки релаксационного процесса в гигагерцовом диапазоне частот с характерными частотами $\nu < 4$ $см^{-1}$ (рис. 1).

В поляризации $E \parallel c$ были зарегистрированы линии поглощения, природа которых связывается нами с электронными переходами в тонкой структуре уровня ^5E ионов Fe^{2+}, наличие которых связано с механизмами зарядовой компенсации при гетеровалентном легировании (рис. 2). В работе представлено сравнение низкоэнергетического электродинамического отклика исследованных составов в зависимости от концентрации титана.

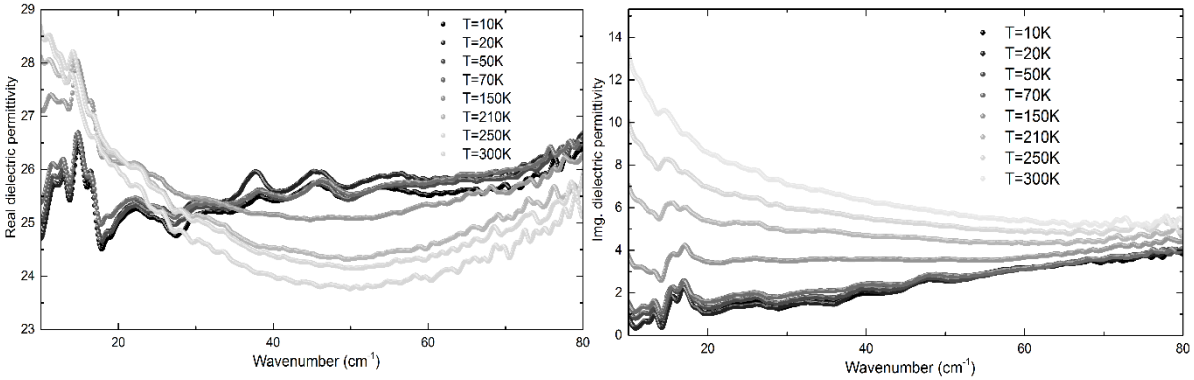


Рис. 1. Температурная динамика комплексной диэлектрической проницаемости кристалла $BaTiFe_{11}O_{19}$ на терагерцовых частотах в поляризации $E \perp c$

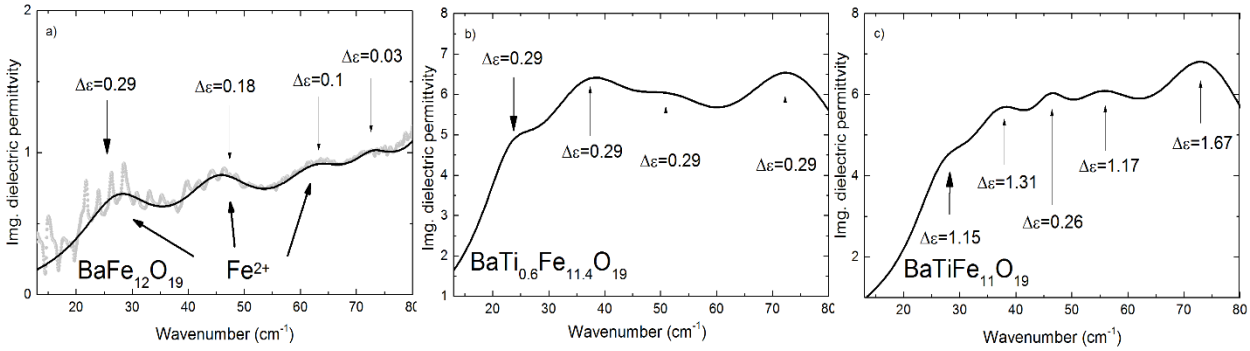


Рис. 2. Модельные кривые спектров мнимой диэлектрической проницаемости в терагерцовой области, в поляризации $E \parallel c$ при температуре 300 К. a) $BaFe_{12}O_{19}$ (точками показаны экспериментальные спектры); b) $BaTi_{0,6}Fe_{11,4}O_{19}$; c) $BaTiFe_{11}O_{19}$

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-32-70012.

Литература

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 $BaFe_{12}O_{19}$ single crystal // The European Physical Journal. 2014. V. 87. P. 232–241.
3. *Vinnik, D. A.,* [*et al.*]. Ti-substituted $BaFe_{12}O_{19}$ single crystal growth and characterization // Crystal Growth Design. 2014. V. 14. P. 5834–5839.

УДК 533.922

Диссоциация воды под действием плазмы лазерного пробоя

***И.В. Баймлер*[1], *Е.В Бармина*[2], *С. В. Гудков*[2], *А.В. Симакин*[2], *Г. А. Шафеев*[2]**

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

Оптический пробой в жидкости происходит на различных примесях, находящихся в жидкости и являющихся поглотителями лазерного излучения. В работе [1] показано, что при добавлении в раствор наночастиц металлов происходит значительное увеличение числа пробоев. Последующие нагрев и ионизация частиц приводят к образованию плазмы, появлению акустических сигналов, изменению физико-химических свойств раствора и самих наночастиц. Излучение плазмы пробоя в свою очередь приводит к реакции диссоциации молекул жидкости. Температуру электронов плазмы оптического пробоя косвенно можно охарактеризовать по выходу продуктов реакции разложения молекул жидкости [2]. Для воды такими продуктами являются молекулярные водород, кислород, перекись водорода, радикал $HO_2^{\cdot}$, атомарный водород. Также наблюдается образование короткоживущего гидроксильного радикала $OH^{\bullet}$ (рис. 1).

В предыдущих работах были установлены основные факторы, влияющие на выход молекулярных водорода и кислорода, а также перекиси водорода при лазерной диссоциации воды в коллоидных растворах наночастиц металлов [3–5]. Поскольку образование перекиси водорода и, как следствие, молекулярного кислорода напрямую зависят от количества выделяемых радикалов, то исследование их выхода при лазерном пробое воды носит первостепенный характер. Таким образом, целью настоящей работы является исследование плазмы оптического пробоя с помощью регистрации выхода гидроксильных радикалов в коллоидных растворах наночастиц металлов.

При лазерном воздействии наносекундного излучения (Nd:YAG лазер, (λ = 1064 нм, τ = 10 нс, частота повторений 8 кГц, энергия в импульсе 1,25 мДж, средняя мощность 20 Вт) на водные коллоидные растворы металлов одновременно происходила регистрация короткоживущих гидроксильных радикалов, образовавшихся в результате разложения молекул воды под влиянием излучения плазмы пробоя. Техника анализа их количества основана на эффекте флюоресценции соединения гидроксильного радикала и молекулы кумарин-3-карбоновой кислоты.

Показано, что концентрация наночастиц влияет на генерацию гидроксильных радикалов, перекиси водорода, молекулярного водорода под действием индуцированного лазерным излучением оптического пробоя. Установлено, что акустические колебания вносят вклад в генерацию гидроксильных радикалов. Максимумы звуковых колебаний совпадают с максимумами выхода продуктов диссоциации молекул воды, а последние также коррелируют между собой (рис. 2–3).

В работе представлены основные механизмы диссоциации молекулы воды и дается оценочная температура электронов плазмы.

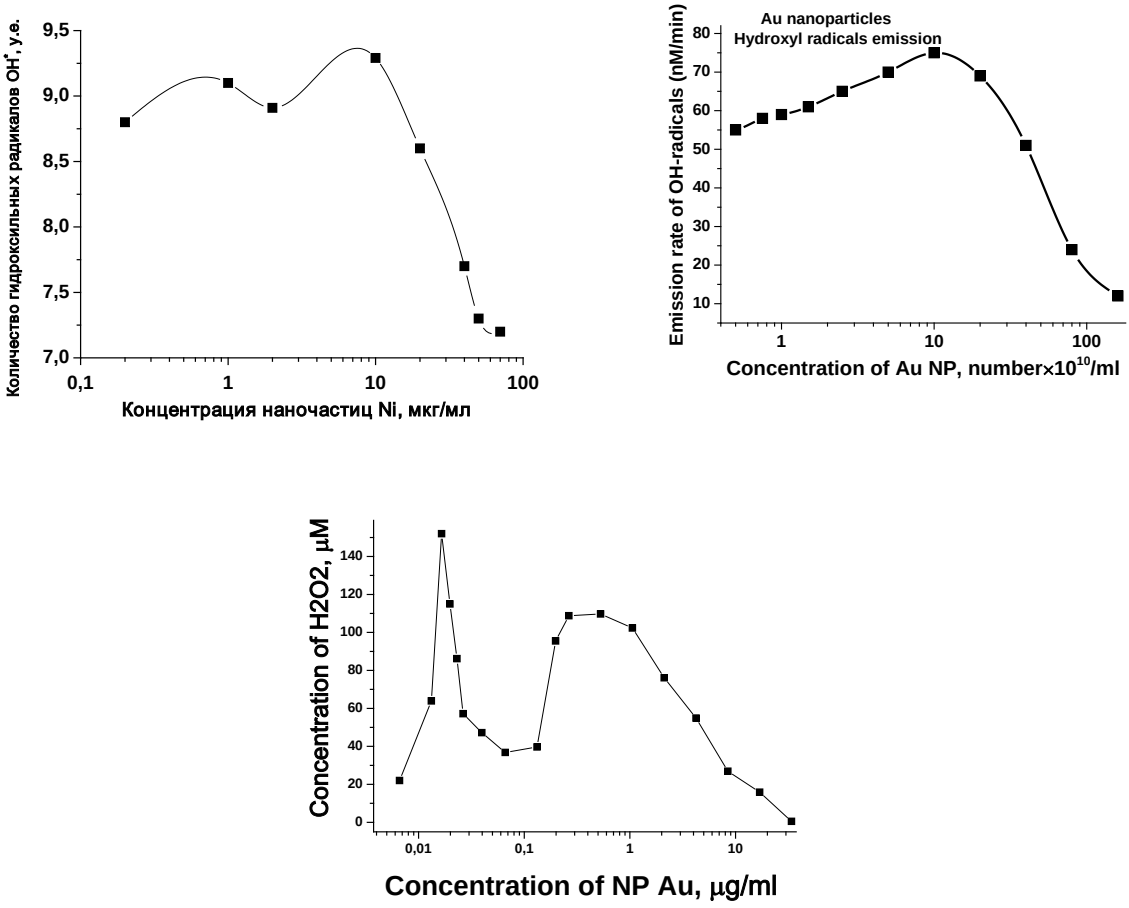


Рис. 1. Зависимость выхода гидроксильных радикалов от концентрации наночастиц Ni (а) и Au (б) в воде при воздействии на них излучения лазера Nd:YAG, время облучения - 3 мин. На нижнем графике показана зависимость выхода перекиси водорода при лазерном пробое коллоида наночастиц золота.

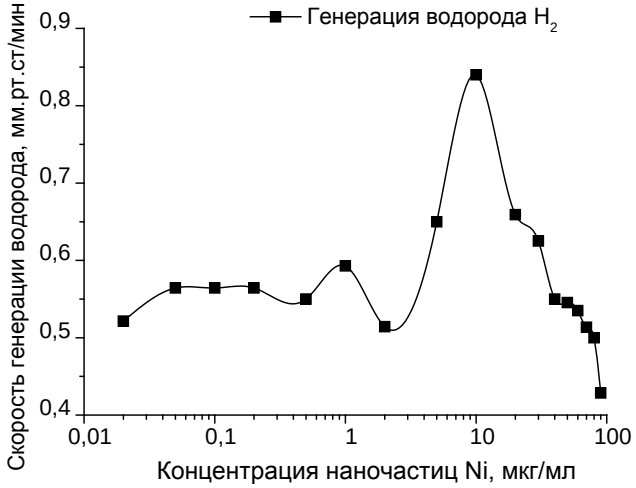


Рис. 2. Зависимость выхода водорода от концентрации наночастиц Ni в воде при воздействии на них излучения лазера Nd:YAG, время облучения – 15 мин

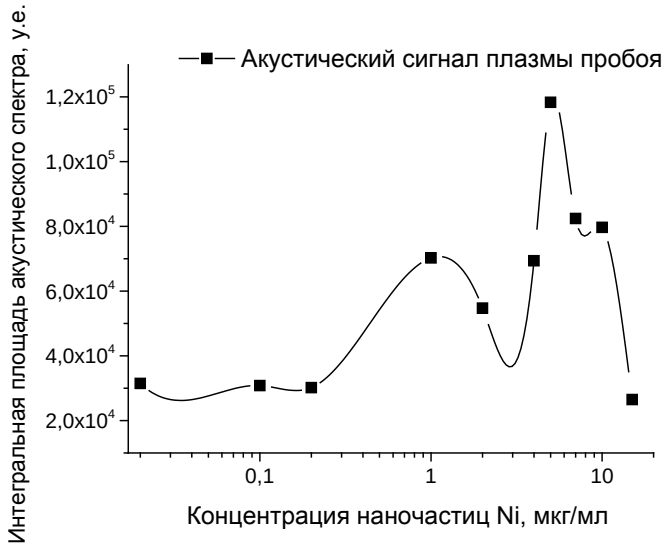


Рис. 3. Зависимость акустического спектра от концентрации наночастиц Ni в воде

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 18-32-01044 и 16-02-01054).

Литература

1. *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.
2. *Mallard G., Linstrom P.J.* NIST Standard Reference Database, 2000, V. 69.
3. *Barmina, E. V., Simakin A.V., Shafeev G.A.* Balance of O2 and H2 content under laser-induced breakdown of aqueous colloidal solutions // Chemical Physics Letters. 2017. 678. P. 192–195.
4. *Barmina, E. V., Gudkov S.V., Simakin A.V., Shafeev G.A.* Stable Products of Laser-Induced Breakdown of Aqueous Colloidal Solutions of Nanoparticles // LMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering. 2017. V. 12. N 3. P. 254–257.
5. *Kalus M., Bärsch N., Streubel R., Gökce E., Barcikowski St., Gökce B.*, Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, N 19, P. 711.

УДК 544.032.4

Изучение влияния термической обработки на структуру стали PH1, полученной методом селективного лазерного плавления

А.С. Лещева, А.И. Горунов, С.А. Никифоров, А.Н. Мухаметов

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева-КАИ

Целью данного исследования является определение влияния термической обработки на микроструктуру и твердость нержавеющей стали, выращенной методом селективного лазерного плавления. Метод селективного лазерного плавления используется для создания деталей и изделий в авиастроительной, автомобильной промышленности, машиностроении. Заинтересованность в данном методе обуславливается получением деталей с механическими свойствами, не уступающими по прочностным характеристикам деталям, отлитым из металла.

В работе исследуется структура и твердость стали PH1. Особенностями нержавеющей стали PH1 являются коррозионная стойкость, высокая твердость, прочность на растяжение, являющиеся преимущественными критериями при выборе материала.

Перед проведением сравнительного анализа влияния термической обработки на структуру и прочностные характеристики стали была измерена твердость исходного образца, а также была определена структура образца до выдержки в печи при 500 °C. Образец имел игольчатую структуру (мартенсит), изображенную на рис. 1.

Термообработка стали проводилась с тремя образцами из нержавеющей стали PH1, полученными методом селективного лазерного плавления, которые выдерживались в печи при температуре равной 500 °C в течение 60, 90 и 180 минут с последующим отпуском на воздухе. На

рис. 2 представлена зависимость твердости от расстояния, на котором была измерена твердость. Из графика видно, что различные временные интервалы термической обработки приводят к увеличению твердости металла, по сравнению с исходным образцом.

Однако, как можно заметить, максимальный эффект от термической обработки достигается, когда время выдержки составляет 60 мин. Можно предположить, что увеличение времени выдержки более 60 минут приводит к образованию структур сорбита и троостита, которые являются причиной общего снижения твердости металла, но увеличивают при этом пластичность металла в целом**.**

Среднее значение твердости исходного образца составляло 518 HV, после выдержки в печи в течение 60 минут при 500 °C и охлаждении на воздухе твердость в среднем составила 671,5 HV**,** что превышает первичное значение твердости практически в 1,3 раза. При нагреве нержавеющей стали в течение 90 минут среднее значение достигло 616 HV, в течение 180 минут – 651 HV. Повышение твердости с применением термической обработки связано со старением металла. Отсюда следует вывод, что наиболее оптимальным режимом обработки, который способствует максимальному увеличению твердости металла, полученного методом селективного лазерного плавления из стали PH1, является выдержка в течение 60 минут при температуре 500 °C с последующим охлаждением на воздухе. Однако режимы, полученные при выдержках в течение 90 и 180 минут соответственно, могут быть использованы для других изделий, требующих сочетания высокой прочности и пластичности.

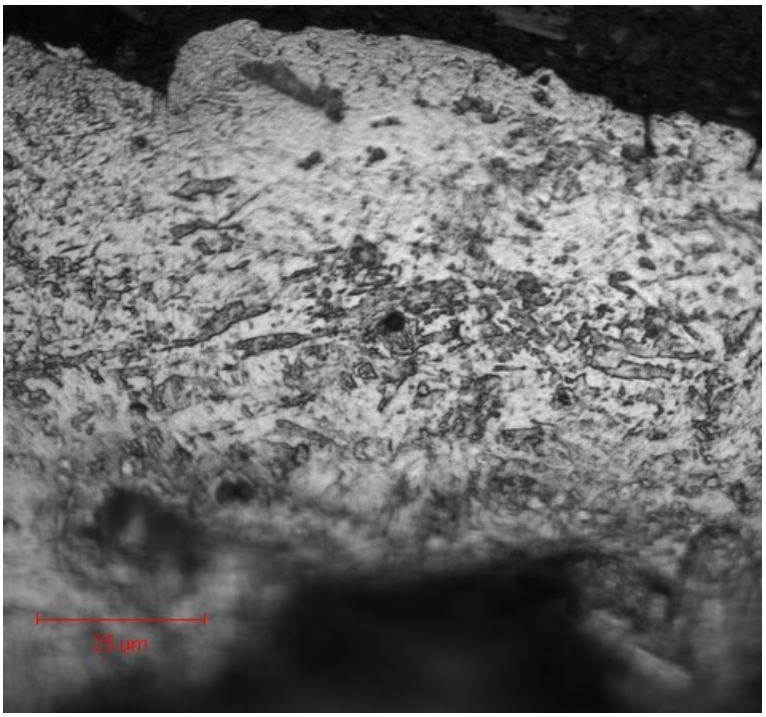


Рис. 1. Структура исходного образца нержавеющей стали PH1

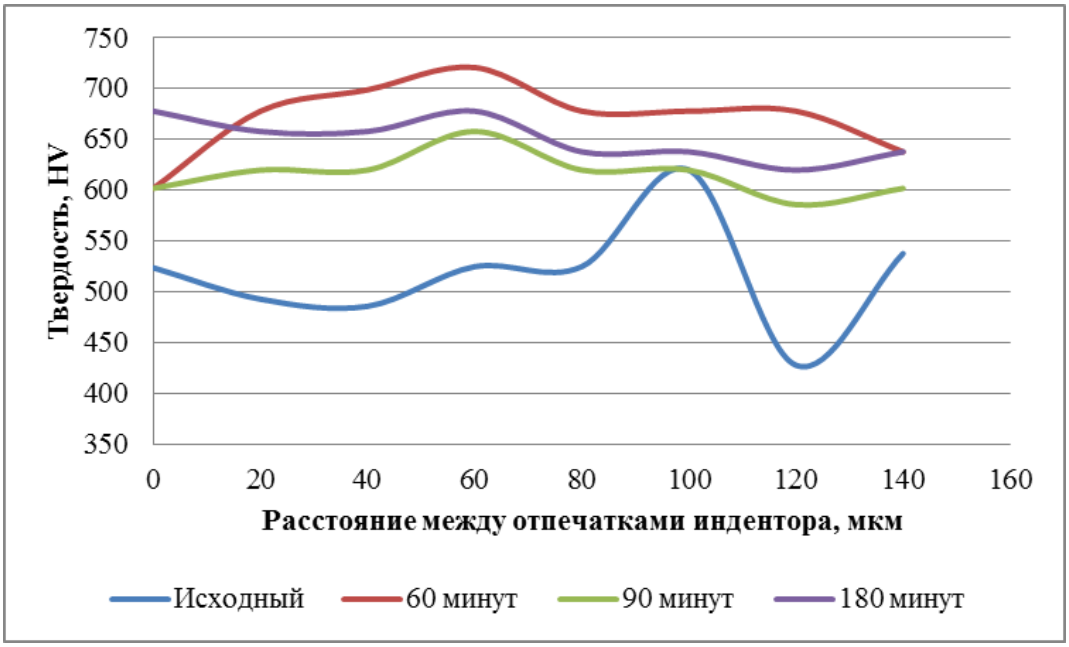


Рис. 2. Зависимость твердости от расстояния между уколами твердомера

Литература

1. *Галимова Л.А., Атрощенко В.В., Смирнов В.В., Чуракова А.А., Гундеров Д.В., Заманова Г.И.* Структура и механические свойства образцов из нержавеющей стали, полученных методом селективного спекания // Вестник Башкирского университета. 2016. Т. 21. № 2. С. 258–263.
2. *Безобразов Ю.А, Зленко М.А, Зотов О.Г., Колбасников Н.Г.* Анализ структуры образцов, полученных DMLS- и SLM- методами быстрого прототипирования // Материалы 6-й международной молодежной научно-практической конференции «Инновационные технологии в металлургии и машиностроении. Уральская научно-педагогическая школа имени профессора А. Ф. Головина». Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2012. С. 154–157.
3. *Stefania Cacace, Ali Gökhan Demir, Quirico Semeraro.* Densification Mechanism for Different Types of Stainless Steel Powders in Selective Laser Melting // Procedia CIRP. 2017. V. 62. P. 475–480.

УДК 543.424.2; 539.194

Анализ изомерного состава алканов по спектрам комбинационного рассеяния света

***М.С. Яблочникова*[1], *Е.А. Сагитова*[2], *К.А. Прохоров*[2]**

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

Физические свойства соединений, содержащих CH_2-цепи, зависят не только от химического состава, но и от сложной структурной организации молекул, которая характеризуется количеством, длиной и конформационным составом CH_2–цепей. Ввиду этого очень важной является задача разработки высокоинформативных и неразрушающих методов количественного анализа структуры таких соединений.

Современные методы синтеза [1] позволяют получать высокочистые разветвленные алканы с заданной молекулярной структурой, а именно, с определенным числом и фиксированной длиной боковых цепей. Анализ колебательных спектров таких веществ представляет значительный практический интерес, в частности, для создания морозостойких машинных масел и для изучения других материалов с похожей химической структурой, например, сополимеров олефинов. Фундаментальная важность такого исследования обусловлена отсутствием знаний о колебательных спектрах и конформационном составе соединений, содержащих CH_2-цепи.

Лазерная спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) света широко используется для определения химического состава органических веществ. Однако за исключением нормальных (одноцепных) алканов (C_nH_{2n+2}), связь спектральных характеристик линий КР (частоты, формы и интенсивности) и структурных характеристик органических молекул до сих пор мало исследована.

В данной работе исследовались спектры КР разветвленных алканов с целью определить линии, чувствительные к количеству и длине боковых CH_2-цепей, и разработать методы спектроскопии КР, позволяющие отличить эти вещества от их изомеров — нормальных алканов. Такие линии были обнаружены в областях 100–500 и 1100–1200 $см^{-1}$, в которых наблюдаются полосы, отвечающие деформационным и валентным колебаниям С–С связей.

Для нормальных алканов положение D-LAM моды [2] смещается к более низким частотам с увеличением количества атомов углерода в молекуле. Эта мода соответствует суперпозиции деформационных колебаний С–С связей в CH_2-цепях, состоящих как из плоских (*транс*-конформеров), так и неплоских (*гош*-конформеров) последовательностей атомов углерода.

В данной работе для разветвленных алканов показано, что частота D-LAM моды зависит от количества боковых цепей и полного числа углеродных атомов в молекуле. В качестве примера на рис. 1а, б показаны структурные формулы и спектры КР алканов с различными количеством и длиной CH_2-цепей. В молекулах разветвленных алканов $(C_8H_{16})_2H_2$ и $(C_6H_{12})_2H_2$ содержатся две боковые CH_2-цепи, молекула нормального алкана C_6H_{14} является одноцепной. Согласно нашим данным спектроскопии КР, при комнатной температуре заметная доля молекул алканов $(C_8H_{16})_2H_2$ и $(C_6H_{12})_2H_2$ имеет следующую структуру: одна из цепей (8 или 6 атомов углерода) находится полностью в *транс*-конформации. Вторая цепь изгибается таким образом, что *транс*-сегменты образуют соответственно 7 и 5 углеродных атомов (рис. 1(а)). Анализ спектров КР показал, что в случае алкана C_6H_{14} D-LAM моде отвечает дублет линий с частотами 318/332 $см^{-1}$, в спектрах КР разветвленных алканов $(C_6H_{12})_2H_2$ и $(C_8H_{16})_2H_2$ эта мода наблюдается на частотах соответственно 238 и 219 $см^{-1}$ (рис. 1б). Используя эти данные, можно оценить общее количество атомов углерода в молекуле.

Линия КР, наблюдающаяся в диапазоне 1100–1200 $см^{-1}$, отвечает симметричному валентному колебанию С–С связей в CH_2-цепях. В спектрах нормальных алканов ее частота однозначно связана с длиной CH_2-цепи в *транс*-конформации [3], выраженной в числе атомов углерода в этой цепи. При комнатной температуре *транс*-конформация является наиболее энергетически выгодной, поэтому для нормальных алканов частота этой линии также является мерой общего числа атомов углерода в молекуле.

Обнаружено, что в спектрах КР разветвленных алканов эта линия имеет частоты, которые соответствуют *транс*-сегментам, содержащим 8 и 6 углеродных атомов для алканов $(C_8H_{16})_2H_2$ и $(C_6H_{12})_2H_2$, соответственно. Высокочастотное крыло этой полосы указывает на наличие более коротких *транс*-сегментов. Следовательно, в спектрах КР разветвленных алканов частота симметричной валентной С–С моды зависит от длины боковой цепи в *транс*-конформации.

Таким образом, совместный мониторинг D-LAM моды и симметричной валентной С-С моды в спектрах КР позволяет характеризовать структуру разветвленных алканов с точки зрения числа атомов углерода в молекуле, длины, количества и конформации боковых цепей и отличать эти соединения от нормальных алканов.

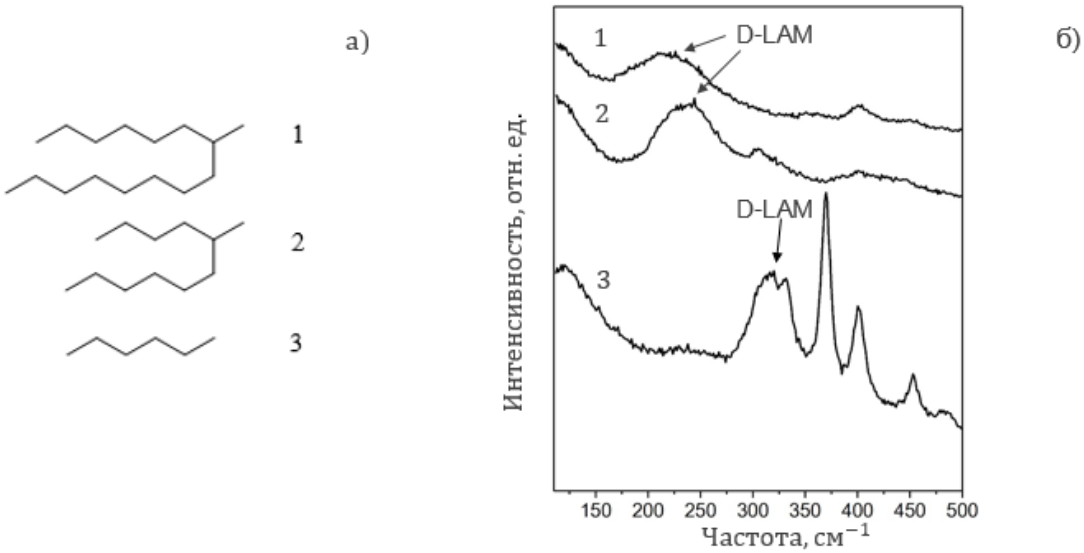


Рис. 1. Структурные формулы (а) и КР спектры (б) алканов: 1 – $(C_8H_{16})_2H_2$, 2 – $(C_6H_{12})_2H_2$, 3 – C_6H_{14}

Работа подготовлена при поддержке Программы Президиума РАН I.7 «Актуальные проблемы фотоники, зондирование неоднородных сред и материалов» (проект «Исследование строения органических молекул, полимеров и полупроводниковых структур методами комбинационного рассеяния света»).

Литература

1. *Nifant'ev I.E., Vinogradov A.A., Vinogradov A.A., Sedov I.V., Dorokhov V.G., Lyadova A.S., Ivchenko P.V.* Structurally uniform 1-hexene, 1-octene, and 1-decene oligomers: Zirconocene/MAO-catalyzed preparation, characterization, and prospects of their use as low-viscosity low-temperature oil base stocks // Appl. Catal. A, General. 2018. V. 549. P. 40–50.
2. *Snyder R.G.* The structure of chain molecules in the liquid state: Low-frequency Raman spectra of n-alkanes and perfluoro-n-alkanes // J. Phys. Chem. 1982. V. 76. P. 3921–3927.
3. *Sagitova E.A., Donfack P., Prokhorov K.A., Nikolaeva G.Yu., Gerasin V.A., Merekalova N.D.,Materny A., Antipov E.M., Pashinin P. P.* Symmetric C-C stretching mode splitting versus CH_2-chain conformation order in sodium montmorillonite modified by cetyltrimethylammonium bromide // J. Phys. Chem. B 2012. V. 216. P. 221–231.

УДК 535-14

Широкодиапазонная спектроскопия твердых растворов замещения на основе гексаферрита бария

***Л.Н.Алябьева*[1], *С.Р. Егиян*[1], *В.И. Торгашев*[2], *Д.А. Винник*[3], *С.А. Гудкова*[1,3], *А.С. Прохоров*[1,4], *Е.С. Жукова*[1], *С. Камба*[5], *М. Дрессель*[1,6], *Б.П. Горшунов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Южный Федеральный Университет
[3]Южно-Уральский государственный университет
[4]Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН
[5]Физический институт Чешской академии наук
[6]1.Physikalisches Institut, Universitat Stuttgart

M-type hexagonal ferrites is a wide family of compounds with general formula $AB_{12}O_{19}$ possessing crystal structure of magnetoplumbite, discovered in the middle of the XX-th centure. Large cation A is usually a Ba^{2+}, that could be replaced by Sr^{2+} or Pb^{2+}, cation B in most cases is Fe^{3+} with or without possible substitution impurities. Giving dielectric and magnetic properties of the compounds, M-hexaferrites are prospective for use in a number of fields and modern devices including magnetic memory, absorbing

coating in radio-frequency range and many others. Magnetic, dielectric, mechanical properties of pure barium hexaferrite $BaFe_{12}O_{19}$ have been widely investigated over last decades, in a broad frequency and temperature ranges [1]. It was shown that different impurities could drastically influence the fundamental properties of the material such as complex dielectric permittivity, magnetic susceptibility, complex refractive index, temperatures of phase transitions and even stability of the magnetic structure. Despite a whole number of studies of barium hexaferrites most of them are focused on radio-frequencies and thus low-energy dynamics remains not well investigated, however in this particular region (about 1THz) a new type of excitation, electromagnons are appear, and as a result, mechanisms that lead to this magneto-electric coupling are still not completely clear.

In this study we compare the effect of partial substitution of 12-coordinated divalent barium ions with divalent lead ions on low-energy lattice dynamics with the influence of substitution of iron sublattice with non-magnetic ions, Al and Ti.

We performed broadband (10^2 Hz to $2*10^{14}$ Hz) spectroscopic investigations of the complex dielectric permittivity of $Ba_{0.3}Pb_{0.7}Fe_{12}O_{19}$, $Ba_{0.8}Pb_{0.2}Fe_{8.7}Al_{3.3}O_{19}$ and $BaFe_{11}TiO_{19}$ at temperatures 5–300 K and under magnetic fields up to 7 T. Various types of dynamical response are detected in different spectral regions, like relaxational behavior of magnetic domains and dynamic exchange between Fe^{3+} and Fe^{2+} ions. The obtained results reveal typical bi-relaxor behavior of the ac response [2]. Investigations of dielectric permittivity and magnetic susceptibility in the radio-frequency range showed two distinct relaxation processes characterized by same values of activation energy. The electronic transitions between fine structure components of the Fe^{2+} ground state reveal themselves as absorption resonances in the range 0,3–3 THz. At T = 80 K dynamic oscillations of the iron ions freezes out indicating localization of the ion in local minima of the potential with complex lineshape. The results obtained revealed the influence of substitution with non-magnetic ions on magnetic anisotropy of the compounds. The nature of the peculiarities observed is discussed in details.

The work was supported by RFBR grant 19-32-70012.

Литература

1. *Pullar, R.C.*. Hexagonal ferrites: a review of the synthesis, properties and applications of hexaferrite ceramics // Progress in Materials Science. 2012. V. 57. I. 7, P. 1191.
2. *Pirc R., Blinc R., Scott J.F.* Mesoscopic model of a system possessing both relaxor ferroelectric and relaxor ferromagnetic properties // Phys.Rev.B. 2009. V. 79. 214114-1.

УДК 535.92

Легированные висмутом волоконные световоды с сердцевиной, изготовленной из нанопористого кварцевого стекла

***Е.А. Пластинин*[1,2], *В.В. Вельмискин*[2], *Л.Д. Исхакова*[2], *В.М. Машинский*[2], *Е.М. Дианов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Научный центр волоконной оптики РАН

Висмутовые волоконные световоды обладают широкой полосой люминесценции в диапазоне 1,1–1,6 мкм, который интересен для нужд медицины, систем связи и астрофизики. В настоящее время основным методом получения таких световодов является технология осаждения из газовой фазы (MCVD, modified chemical vapor deposition), при использовании которой возникает ряд проблем. Главными из них являются: резкий рост оптических потерь при увеличении концентрации висмута более 0,01 ат.% и слабая воспроизводимость результатов [1].

Одним из альтернативных методов получения легированных висмутом волоконных световодов является метод пропитывания мезопористых кварцевых стёкол. Такие пористые стёкла (ПС) могут быть получены методом двухфазного разделения щёлочно-боросиликатного стекла и последующим вытравливанием одной из фаз [2].

В данной работе для проведения исследований были использованы образцы пористых стёкол (ПС), предоставленные National Laboratory for Optoelectronics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan (China). Было проведено сравнение состава и структуры данных пористых

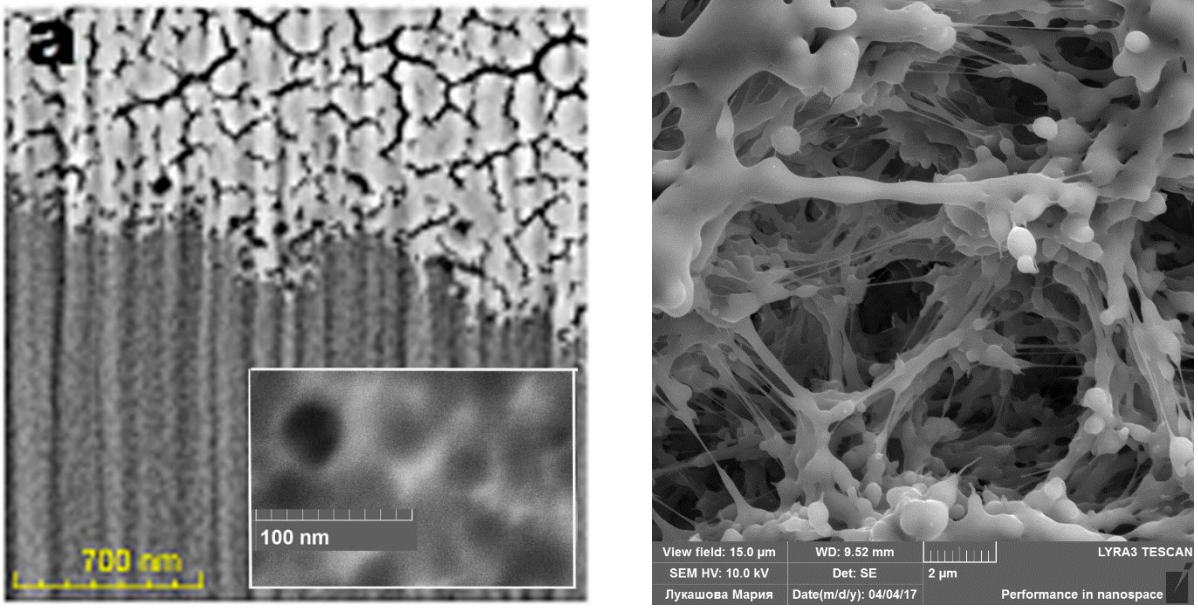
стёкол со структурой пористых MCVD-слоёв. Распределение пор в ПС более гомогенно, чем в MCVD-слоях, а средний размер пор на 2–3 порядка меньше (рис. 1) [3].

Образцы ПС, полученных методом двухфазного разделения щёлочно-боросиликатного стекла, были использованы для получения объёмных образцов стекла, легированных висмутом. Для этого штабики длиной порядка 2 см и диаметром порядка 3 мм пропитывали нитратом висмута. Затем при температуре 500 °С в печи происходило разложение нитрата. Далее при температуре 1000 °С производили спекание образцов с закрытием пор. Получены серии объёмных образцов с различной концентрацией висмута от 0,01 до 1,0 ат.%.

Проведённые спектроскопические измерения показали существование трёх основных источников люминесценции: активные висмутовые центры на кремнии, алюминии, а также ионы Bi^{2+}. Кроме того, они позволили определить оптимальную концентрацию висмута: 0,1–0,2 ат.%. Отдельно была проверена воспроизводимость процесса введения висмута.

Из полученных образцов были изготовлены световоды с различной концентрацией висмута в сердцевине. Спектры оптических потерь соответствуют спектрам потерь световодов, полученных по технологии MCVD. Для различных условий накачки были получены спектры потерь в ближнем инфракрасном диапазоне для световодов с концентрацией висмута, близкой к оптимальной (рис. 2). Были получены низкие потери в области 1150 нм. Как показал анализ состава, для улучшения результатов и получения генерации необходимо избавиться от примесей переходных металлов, а также понизить содержание ОН-групп в стекле.

Результаты исследования показали, что нанопористые стёкла, полученные методом двухфазного разделения щёлочно-боросиликатного стекла, обладают аналогичными по отношению к MCVD-стёклам спектроскопическими свойствами, при этом доступная для введения концентрация висмута на порядок больше.



а) Нанопористое стекло б) Пористый MCVD-слой

Рис. 1. Изображения, полученные на сканирующем электронном микроскопе

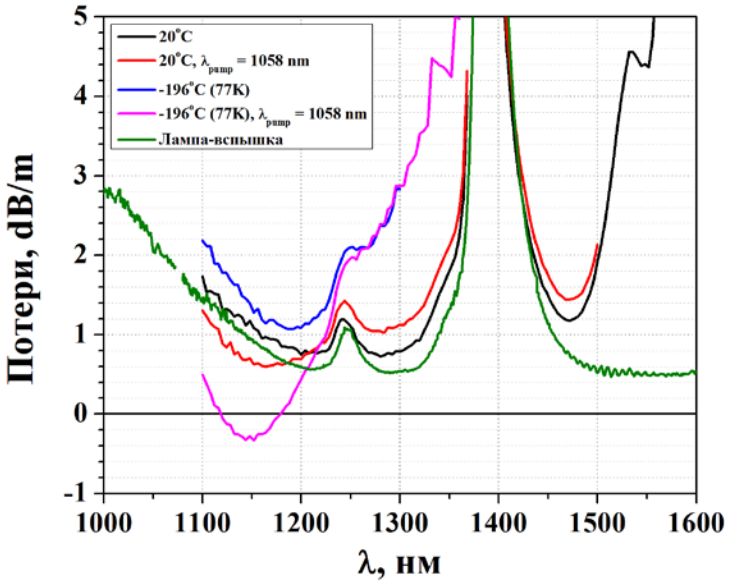


Рис. 2 Спектр потерь в висмутовом волоконном световоде с концентрацией висмута 0.14 ат.%. Измерения проведены при различных условиях накачки: при комнатной температуре без и с накачкой иттербиевым лазером; при температуре кипения жидкого азота без и с накачкой иттербиевым лазером; при накачке лампой-вспышкой

Литература

1. *Исхакова Л.Д.* [*и др.*] Идентификация нанокристаллических включений, индивидуальных атомов Bi и Bi-кластеров в активированных висмутом оптических материалах // Сборник трудов 15-й Международной научной конференции-школы «Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение». 2016. С. 161.
2. *Zhou S.* [*et al.*] Space-selective control of luminescence inside the Bi-doped mesoporous silica glass by a femtosecond laser // Journal of Materials Chemistry. 2009. V.19(26). P.4603–4608.
3. *Iskhakova L.D.* [*et al.*] Microstructure, composition, and luminescent properties of bismuth-doped porous glass and optical fiber preforms // Journal of Non-Crystalline Solids. 2018.

УДК 53.043

Перспективные направления в микро- и наноструктурировании объёма прозрачных диэлектриков сверхкороткими лазерными импульсами

А.Г. Охримчук

Научный центр волоконной оптики РАН
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Фемтосекундная лазерная микрообработка и прямая лазерная запись структур внутри диэлектриков и полупроводников востребована для множества применений от интегральной оптики и микрофлюидики до многомерной оптической памяти [1]. В результате 20-летних исследований с момента открытия явления сохраняющейся модификации показателя преломления жёстко сфокусированным пучком фемтосекундного лазера в объёме стекла в 1996 ([2]) выявлено четыре наиболее перспективных областей применения этой технологии: 1) запись волноводных структур в 3D формате для оптических компьютеров, микро-лазеров, сенсоров; 2) формирование микроканалов для протока жидкостей и создание на этой основе сенсоров типа «lab-on a-Chip; 3) запись брэгговских решёток в волоконных световодах; 4) многомерная оптическая память с практически неограниченным сроком хранения.

В качестве примера развития техники такой микрообработки рассмотрим метод гребёнок импульсов. Обычно используется последовательность сверхкоротких импульсов, генерируемая фемтосекундными осциллятором с интервалом между импульсами 10–100 нс, или регенеративным усилителем с расстоянием между импульсами 1–1000 мкс. Последовательность гребёнок (пачек)

сверхкоротких импульсов с интервалом между импульсами 0,1–1 мкс предоставляет дополнительный «рычаг» контроля морфологии модифицируемых областей благодаря независимому контролю за температурой обрабатываемой области материала и пиковой мощностью лазерных импульсов [1, 2]. При этом накопление тепла в зоне воздействия происходит за время действия суб-микросекундной гребёнки импульсов.

Динамическое растяжение материала в области воздействия лазерного пучка наряду с нагревом является другим важным фактором, определяющим структурные изменения вещества [3]. В наших экспериментах мы впервые продемонстрировали, что эффект от воздействия сверхкоротких импульсов на вещество усиливается, если оно происходит в фазе растяжения материала [4]. С помощью интерферометра Фабри–Перо генерировалась гребёнка фемтосекундных импульсов с интервалом между импульсами 10–10000 пс. Было установлено, что при равных энергиях гребёнки и одиночного импульса, гребёнка импульсов с ниспадающей по экспоненциальному закону огибающей производит увеличенное в 4–6 раз сохраняющееся изменение показателя преломления Δn в кварцевом стекле и сапфире по сравнению с одиночным импульсом. Наибольший эффект наблюдается при интервале между импульсами в гребёнке 100–2000 пс для кварцевого стекла и 50–2000 пс для сапфира. Связь между сохраняющемся изменением показателя преломления Δn и деформацией материала во время и в зоне воздействия фемтосекундных импульсов выражается эмпирической формулой:

$$\Delta n = \Delta n_0 + \eta \int_{\text{mod}} \varepsilon(\Delta t) dV \,. \qquad (1)$$

где Δn_0 – изменение показателя преломления, вызванное воздействием одиночного импульса с энергией, равной энергии гребёнки, $\varepsilon(\Delta t)$ – главный компонент тензора деформации, Δt – интервал между импульсами, η – материально- зависимый коэффициент.

Кроме того, установлено, что увеличенное изменение показателя преломления в кварцевом стекле принадлежит высокостабильной двулучепреломляющей структуре, медленная ось которой совпадает с плоскостью поляризации фемтосекундного пучка.

В дополнение к растяжению, ниспадающая огибающая гребёнки минимизирует размеры области электронно-дырочной плазмы вследствие того, что энергия только первого импульса гребёнки достигает порога оптического пробоя «холодного» вещества, а «хвост» гребёнки поглощается только короткоживущими электронными возбуждениями (экситонами, центрами окраски), и тем самым увеличивается плотность поглощённой энергии по отношению к плотности, производимой одиночным импульсом. Благодаря этому также уменьшается негативный эффект отражения излучения от электронно-дырочной плазмы.

Оптимальный интервал между импульсами в гребёнке определяется упругими коэффициентами материала. Установлено, что он равен 95 пс для кварцевого стекла и 60 пс для сапфира и соответствует задержке максимального растяжения материала после воздействия фемтосекундного импульса.

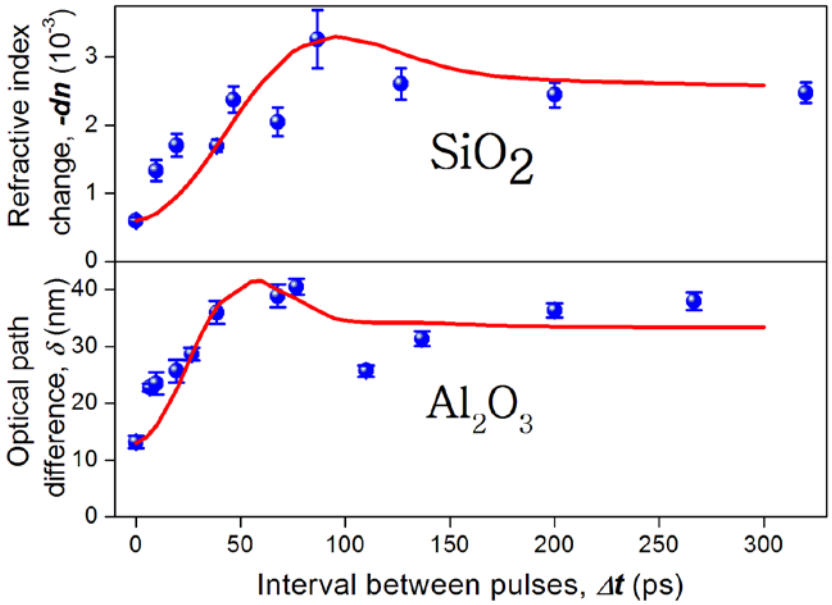


Рис. 1. Измеренные изменение показателя преломления и разность опического пути (синие точки) и расчетный вклад в изменение показателя преломления, вызванный деформацией растяжения в области воздействия лазерного импульса (красная сплошная линия) в зависимости от интервала между имплсьсами в гребенке

Литература

1. *Gattass R.R., Cerami L.R., and Mazur E.* Micromachining of bulk glass with bursts of femtosecond laser pulses at variable repetition rates // Opt. Express. 2006. V. 14. N 12. P. 5279.
2. *Davis K.M., Miura K., Sugimoto N., and Hirao K.* Writing waveguides in glass with a femtosecond laser // Opt. Lett. 1996. **21**. 1729.
3. *Rezaei S., Li J., and Herman P.R.* Burst train generator of high energy femtosecond laser pulses for driving heat accumulation effect during micromachining // Opt. Lett. 2015. V. 40, N 9, P. 2064–7.
4. *Sakakura M., Terazima M., Shimotsuma Y., Miura K., and Hirao K.* Observation of pressure wave generated by focusing a femtosecond laser pulse inside a glass // Opt. Express. 2007. V. 15. N 9. P. 5674–5686.
5. *Okhrimchuk A., Fedotov S., Glebov I., Sigaev V. and Kazansky P.* Single shot laser writing with subnanosecond and nanosecond bursts of femtosecond pulses// Scientific Reports. 2017. 7. P. 16563.

УДК 537.9

Температурные особенности спектров поглощения пленок из неупорядоченных однослойных нанотрубок различной длины

***Е.А. Симчук*[1], *С.С. Жуков*[1], *Е.С. Жукова*[1], *А.П. Цапенко*[2], *А. Насибулин*[2], *Б.П. Горшунов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Сколковский институт науки и технологий

Крупномасштабные пленки из неупорядоченных углеродных нанотрубок (УНТ) представляют собой материал, физические свойства которого определяются индивидуальными параметрами отдельных УНТ, способом изготовления пленок и процессом постобработки [1]. Ввиду потенциальной привлекательности применения пленок УНТ в фотонике и электронике, понимание фундаментальных механизмов взаимодействия электромагнитного излучения с данными объектами особенно актуально. В настоящее время хорошо отработан метод, позволяющий получать пленки больших площадей с различной толщиной и состоящие из нанотрубок фиксированной длины [2]. В данной работе было изучено влияние длины нанотрубок, составляющих пленку, на ее прозрачность и проводимость.

Нами были проведены измерения спектров пропускания и кондактанса пленок из УНТ различной длины в диапазоне частот от 5 до 15000 см$^{-1}$ и при температурах от 4 до 300 К. Измерения проводились с применением стандартного фурье-спектрометра (50–15 000 см$^{-1}$) и импульсного терагерцового спектрометра (5–100 см$^{-1}$). Крупномасштабные образцы пленок из высококачественных УНТ были изготовлены методом осаждения из газовой фазы [2]. Длины нанотрубок варьировались в диапазоне от 0,3 до 40 мкм, а толщины пленок от 40 до 400 нм. Поскольку пленки из коротких трубок в свободновисящем состоянии недостаточно прочные для проведения многократных измерений, а размер образцов превышал 5 мм в диаметре, то пленки переносились на подложку из полиэтилена толщиной 5 мкм.

На рис. 1, а приведена температурная зависимость спектров пропускания образца, состоящего из трубок длиной 0,3 мкм. Как видно из рисунка, спектр на частотах выше 80 см$^{-1}$ слабо изменяется с температурой. На низких частотах с понижением температуры пропускание пленки монотонно уменьшается. Обработка инфракрасных спектров пропускания совместно с напрямую измеренными терагерцовыми спектрами проводимости позволила получить температурную зависимость широкодиапазонных спектров комплексной проводимости пленок. Так как толщины пленок из трубок различных длин варьировались, для удобства анализа величина реальной части комплексной проводимости умножением на толщину пленки была приведена к безразмерной величине, обратной «sheet resistance» – кондактанса [3, 4]. На рис. 1б показаны температурные зависимости кондактанса пленок с различными длинами УНТ. Видно, что поведение спектров для длинных (13 мкм и 40 мкм) и коротких (0,3 мкм и 1 мкм) трубок на низких частотах, ниже 2 ТГц, существенно различается. Кондактанс пленок из длинных трубок сначала растет с понижением температуры, а потом начинает уменьшаться. При этом температура, при которой изменяется характер зависимости, определяется длиной трубок. Для образцов, состоящих из более коротких УНТ, проводимость пленок монотонно уменьшается с понижением температуры во всем интервале.

В терагерцовой области на частотах от 5 до 80 см$^{-1}$ в спектрах кондактанса у всех пленок УНТ различной длины наблюдается пик. Частота пика при комнатной температуре растет с уменьшением длины нанотрубок. При этом температурная динамика пика одинакова для всех исследованных образцов: частота пика с понижением температуры смещается в более высокочастотную область спектра. В работе обсуждаются механизмы, ответственные за наблюдаемый низкочастотный отклик носителей в крупномасштабных пленках одностенных углеродных нанотрубках.

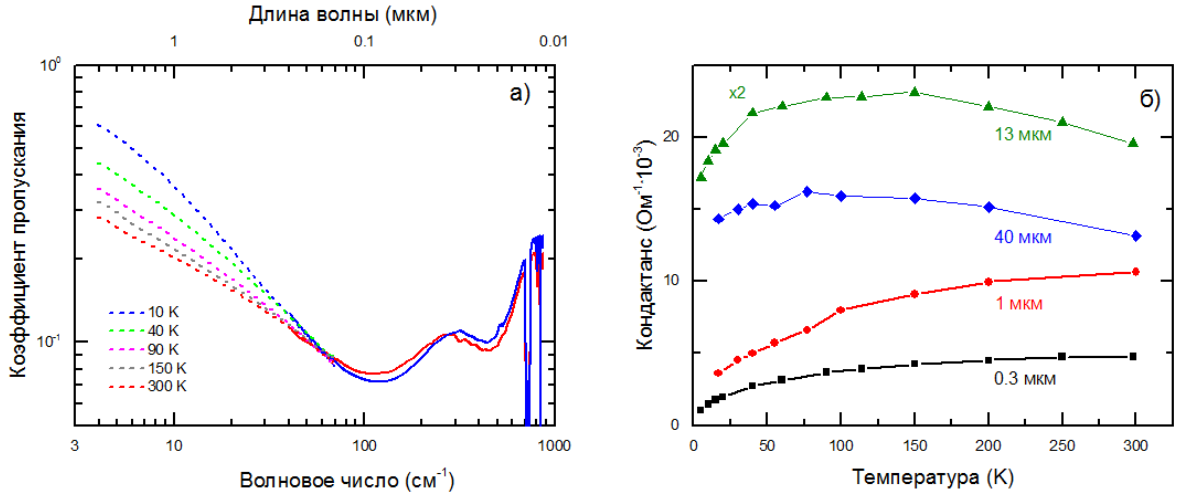


Рис. 1. а) Спектры пропускания пленки нанотрубок длиной 0.3 мкм для различных температур. б) Температурная зависимость импеданса пленок с различными длинами УНТ, измеренная на частоте 5 см$^{-1}$ (для наглядности, величина кондактанса пленок с длиной УНТ 13 мкм уменьшена вдвое)

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00246.

Литература

1. *Masashi Shiraishi* [*et al.*]. Conduction mechanisms in single-walled carbon nanotubes // Synthetic Metals 2002. V. 128. I. 3. P. 235–239.
2. *Moisala A.* [*et al.*]. Single-walled carbon nanotube synthesis using ferrocene and iron pentacarbonyl in a laminar flow reactor // Chem. Eng. Sci. 2006. V. 61. N 13. P. 4393–4402.

3. *Zhukova E.S.* [*et al.*]. Terahertz-infrared electrodynamics of single-wall carbon nanotube films //Nanotechnology 2017. V. 28. N 44.
4. *Gorshunov B.P.* [*et al.*]. Terahertz spectroscopy of charge transport in films of pristine and doped single-wall carbon nanotubes // Carbon 2018. V. 126. P. 544–551.

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ

Председатель: О.Ф. Петров (д.ф.-м.н., акад. РАН, профессор)

Зам. председателя: Е.А. Лисин (к.ф.-м.н.)

Секретарь: Д.В. Сазонова

Дата: 22.11.2018

Время: 10:00-16:30

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 7, ауд. 106-107 БФК, МФТИ

УДК 533.723

Экспериментальное изучение сценария фазовых переходов в квазидвумерных плазменно-пылевых системах

А.А. Алексеевская, М.М. Васильев

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

Проблема, решению которой посвящена данная работа, является актуальной в области физики плазмы. В последнее время особенный интерес вызывает изучение фазовых переходов в плазменно-пылевой системе. В настоящее время существуют две основные теоретические модели, описывающие плавление в двумерных системах. Согласно одной из них, так называемой теории Березинского–Костерлица–Таулесса (БКТ), переход двумерной системы из кристаллического состояния в жидкое носит двухстадийный характер с образованием промежуточной фазы [1, 2]. Другая известная теория GBI (grain-boundary induced melting) плавление двумерных систем описывает фазовый переход от кристалла к жидкости без формирования какой-либо промежуточной фазы [3–5]. Плазменно-пылевые системы в ВЧ-разряде являются существенно открытыми, и фазовый переход в таких системах может меняться в зависимости от способа их кинетического разогрева. В рамках работы предполагалось осуществить разогрев части структуры и пронаблюдать сценарий фазового перехода для ее различных областей (возмущенной и невозмущенной части). Настоящая работа посвящена экспериментальному исследованию фазовых переходов в квазидвумерных плазменно-пылевых системах.

Для изучения сценария фазового перехода была проведена серия экспериментов при неизменных параметрах разряда. Эксперименты проводились в газоразрядной вакуумной камере, в которую были помещены два электрода. В разряд вбрасывались пластиковые частицы, покрытые медью (d = 9,95 мкм). Для удержания пылевого облака в горизонтальном направлении на нижнем электроде устанавливалось кольцо диаметра 8,5 см, формирующее потенциальную ловушку. В качестве буферного газа использовался аргон. Структура подсвечивалась твердотельным лазером. Воздействие на часть структуры осуществлялась с помощью аргонового лазера (0,07–0,34 Вт). 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. Для того чтобы охарактеризовать две части структуры, были построены парные корреляционные функции и определены параметры неидеальности при различных мощностях аргонового лазера для невозмущенной и возмущенной областей, по которым был сделан вывод, что структура из кристаллического переходит в жидкостное состояние. Далее были посчитаны кинетические температуры в возмущенной и невозмущенных областях и сделан вывод,

что кинетическая температура увеличивается при увеличении мощности лазерного излучения не только в области воздействия, но и в невозмущенной области за счет взаимодействия частиц. Так как эксперимент проводился при неизменных параметрах разряда, и взаимодействие между частицами остается прежним, а кинетическая энергия растет, можно наблюдать фазовый переход. Для этого необходимо анализировать не только парные корреляционные функции, но и взаимные концентрации дефектов в структуре, так как как еще одним критерием сценария БКТ-теории является тот факт, что фазовый переход идет с образованием свободных дисклинаций и дислокаций. В то время как связанные дислокационные пары не искажают кристаллическую решетку, свободные – нарушают. Значит, анализируя такую систему, можно сделать вывод о сценарии фазового перехода.

Литература

1. *Петров О. Ф.* [*и др.*]. Двумерный фазовый переход в сильно неидеальной пылевой плазме // ЖЭТФ. 2015. Т. 147. В. 2. С. 372.
2. *Petrov O.F., Vasiliev M.M., Vaulina O.S.* [*et. al.*]. Solid-hexatic-liquid transition in a two-dimensional system of charged dust particles // EPL. 2015. V.111 (4). P. 45002.
3. *Strandburg K.J.* Two-dimensional melting // Reviews of Modern Physics. 1988. V. 60. N 1. P. 161.
4. *Nosenko V.* [*et al.*]. 2D Melting of Plasma Crystals: Equilibrium and Nonequilibrium Regimes // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. N 1. P. 5001.
5. *Nosenko V.* [*et al.*] Laser method of heating monolayer dusty plasmas // Physics of Plasmas. 2006. V. 13. N. 3. P. 2106

УДК 533.9...15

Расчёт влияния градиента температуры вдоль стенки газоразрядной трубки на ориентацию одномерных плазменно-пылевых структур при криогенных температурах

Е.А. Алексеевская[1]***, Р.Е. Болтнев***[2,3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Институт энергетических проблем химической физики

В экспериментах по исследованию плазменно-пылевых структур в тлеющем разряде постоянного тока при криогенных температурах было обнаружено отклонение от вертикальной оси цепочек, образованной микрочастицами диоксида церия. В предположении, что отклонение вызвано наличием температурного градиента вдоль поверхности разрядной трубки, нами была построена теоретическая модель, которая позволила нам оценить значения температурного градиента из величин отклонения цепочек от вертикали. Для наблюдаемых углов отклонения были получены величины температурного градиента ≈ 10 К/см. Экспериментально установлено, что реальные значения градиента на стенке газоразрядной трубки при охлаждении её парами гелия имеют значения ~ 1 К/см.

В данной работе для объяснения наблюдаемого расхождения между полученными экспериментальными значениями и теоретическими оценками будут представлены результаты расчётов с использованием расширенной модели, в которой учитывается наличие объёмного заряда на пылевых частицах в страте и уточняется профиль радиального электрического поля.

УДК 533.9.03

Спектральные характеристики теплового движения заряженных частиц в изотропной ловушке в присутствии магнитного поля

Э.А. Саметов, О.С. Ваулина

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Значительный рост интереса к исследованиям динамики заряженных частиц во внешних электромагнитных полях, наблюдаемый в настоящее время, по большей части связан с проблемами эффективности энергетических установок для Управляемого Термоядерного Синтеза, а также с развитием плазменных методов переработки Отработанного Ядерного Топлива (ОЯТ) и Радиоактивных Отходов (РАО).

В настоящей работе представлены результаты аналитического и численного исследований влияния постоянного магнитного поля на спектральные характеристики теплового движения заряженных частиц в изотропной электростатической ловушке. Предложено аналитическое соотношение для спектральной плотности смещений центра масс исследуемых систем. Полученное соотношение проверено путем численного моделирования для ансамблей с различным количеством частиц, взаимодействующих с кулоновским потенциалом в широком диапазоне параметров.

Результаты настоящей работы применимы для ограниченных систем при любом типе попарных взаимодействий и могут быть полезны для разработки новых методов диагностики физических характеристик таких систем, а также для анализа условий формирования различных кластеров, которые представляют интерес в физике плазмы, медицине, биологии, физике полимеров и коллоидных систем.

Данная работа была поддержана Российским Научным Фондом (грант № 14-29-00231).

УДК 533.9.082

Цифровая голография в задаче диагностики плазменно-пылевых образований

А.В. Бульба

Петрозаводский государственный университет

При определенных условиях в плазме, например, в тлеющем разряде постоянного тока в газах из введенных в плазму макрочастиц размером от нескольких до сотен микрометров возникают самоупорядоченные плазменно-пылевые объекты размером от десятков микрон до нескольких сантиметров в зависимости от условий эксперимента (рис. 1а). Получить информацию о пространственных характеристиках таких структур (форме, степени упорядоченности, межчастичных расстояниях и концентрации) возможно с использованием ряда оптических методов, например: наблюдение срезов в лазерном ноже, стереоскопический подход или применение оптической томографии. При этом существенные ограничения накладывает недостаточная глубина резкости оптической системы, малое количество ракурсов наблюдения и осцилляция частиц.

Голографический подход регистрации частиц плазменно-пылевых образований с использованием полупроводниковых матриц позволил бы быстро записывать, хранить и обрабатывать информацию о расположении частиц объекта в пространстве. При этом реконструкцию объема структуры можно осуществлять компьютерной постфокусировкой, восстанавливая последовательность изображений, отстоящих от фотоматрицы. Идею использования компьютерной постобработки для восстановления голографически записанных изображений можно встретить в работах [1–3]. Чаще в публикациях встречается описание получения голограммы, реализованной по схеме Габора [4].

Модельные эксперименты показали, что реализация осевой схемы голографирования приводит к существенному искажению опорного пучка вследствие прохождения его через стенки стеклянной газоразрядной трубки. Кроме того, интенсивность опорного пучка на фоне объектного (от частиц «кристалла») настолько велика, что делает невозможным получение голограммы, а его ослабление невозможно, т.к. автоматически ослабляет и объектную волну.

Таким образом, остаётся использовать схему с двумя пучками (рис. 1б). Луч, идущий от лазера, первым расщепителем разделяется на опорный и объектный. При этом объектный направляется в газоразрядную трубку под углом 90° относительно объектива. Рассеянное частицами в направление объектива излучение собирается объективом и направляется во второй расщепитель, который направляет объектную и опорную волны на матрицу видеокамеры. В этой схеме у нас отсутствует искажение опорной волны, и появляется возможность регулировать её интенсивность. Объектив предлагается использовать с большим рабочим расстоянием (25–30 мм), что позволит однозначно настроиться на пылевое образование.

Численное восстановление голографически записанного изображения возможно реализовать так называемым «методом свёртки» [4, 5]. В этом методе выражение для результирующего поля записывается в следующем виде:

$$Q(\xi,\eta) = \Im^{-1}\left\{\Im^{+1}\left[I(x,y)B(x,y)\right]\times\Im^{+1}\left[\frac{1}{i\lambda d}e^{i\frac{2\pi d}{\lambda}}e^{\frac{i\pi}{\lambda d}(\xi^2+\eta^2)}\right]\right\}, \quad (1)$$

где $Q(\xi,\eta)$ – восстановленное дифрагированное поле в плоскости изображения (ξ,η) на расстоянии d от плоскости голограммы (x, y), $I(x,y)$ – распределение интенсивности в плоскости записи голограммы, $B(x,y)$ – опорная волна, λ – длина волны когерентного излучения, $\Im^{\pm1}[]$ – обозначает преобразование Фурье своего аргумента.

Реконструкцию можно выполнить для различных значений расстояния «d» из формулы (1) при визуальной или автоматизированной оценке качества фокусировки. После этого появляется возможность по слоям восстановить пространственное распределение частиц объекта.

Для тестирования метода цифровой голографии разработана «Программа для восстановления голографически записанных изображений и определения пространственного расположения точечных объектов «Digital Holography» (свидетельство о государственной регистрации в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ) программы для ЭВМ № 2009614972.

Предварительное тестирование проводилось на 14 калиброванных частицах Al_2O_3 размером 100 мкм, расположенных на стеклянной пластинке. Для тестирования использовалась схема Габора с гелий-неоновым лазером. Расстояние d между частицами и матрицей фотоаппарата (Canon EOS 10D) составляет в эксперименте 144 мм, размер пикселя равен 0,007 мм, время экспозиции выбрано 1/4000 с, светочувствительность по ISO равна 100, размер кадра составлял 3072×2048 пикселей. Далее при обработке использовался фрагмент 1024×1024 пикселей. Голограмма частиц и успешный результат восстановления представлены на рис. 2а, б.

Таким образом, разработанная программа успешно опробована на тестовом стенде и работа в этом направлении будет продолжена по внеосевой схеме (рис. 1б) непосредственно с плазменно-пылевыми образованиями (рис. 1а).

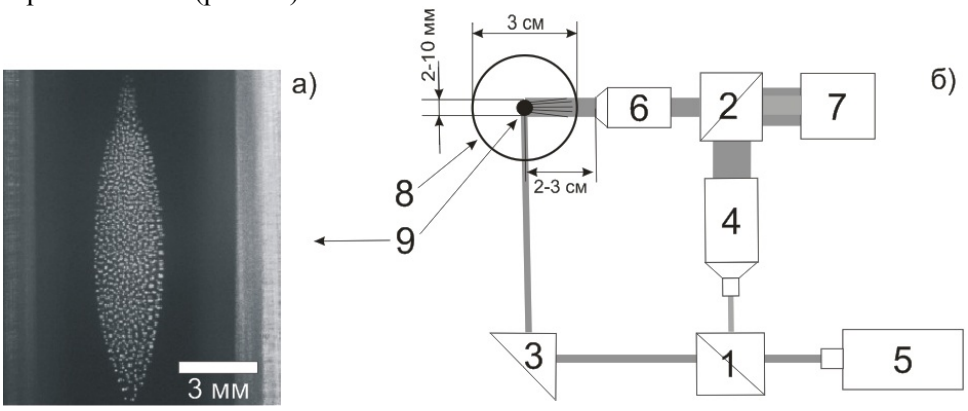


Рис. 1. а) Пылевое образование из частиц Al_2O_3 в тлеющем разряде Ne (P=80 Па, I=0.3 мА).
б) Внеосевая схема голографирования плазменного «кристалла». 1 – первый расщепитель, 2 – второй расщепитель, 3 – призма, 4 – расширитель, 5 – одночастотный одномодовый лазер 532 нм, 6 – объектив микроскопа (x2, x5) с рабочим расстоянием 3 см, 7 – скоростная камера, 8 – газоразрядная стеклянная трубка, 9 – плазменно-пылевое образование

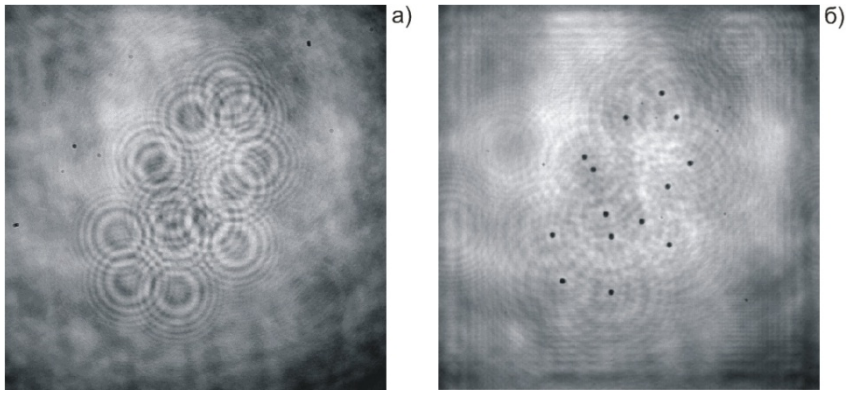


Рис. 2. а) Голограмма 14-и калиброванных частиц Al_2O_3. б) Результат восстановления частиц

Литература

1. *Goodman J.W., Lawrence R.W.* Digital image formation from electronically detected holograms // Appl. Phys. Lett. 1967. V. 11. P. 77–79.
2. *Kronrod R.W., Merzlyakov N.S., Yaroslavskii L.P.* Reconstruction of a hologram with a computer // Sov. J. Tech. Phys. 1972. V. 17. P. 333–334.
3. *Ярославский Л.П.* Цифровая обработка сигналов в оптике и голографии: Введение в цифровую оптику. М.: Радио и связь, 1987. С. 243–286.
4. *Gang Pan, Hui Meng*. Digital Holography of particle fields: reconstruction by use of complex amplitude // Applied optics. 2003. V. 42. N 5.
5. *Балтийский С.А., Гуров И.П., Де Никола С., Коппола Д., Феррaро П.* Современные методы цифровой голографии / В кн.: Проблемы когерентной и нелинейной оптики / Под ред. И.П. Гурова и С.А. Козлова. СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. С. 91–117.

УДК 539.194

Термодинамические функции нейтрального и положительного иона гидрида аргона

М.А. Мальцев, И.В. Морозов, Е.Л. Осина

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

Заряженные двухатомные соединения с аргоном играют важную роль в масс-спектрометрии с аргоновыми источниками плазмы, такими как лазерная абляция индуктивно связанной плазменной масс-спектрометрии (LA-ICP-MS) [1]. Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС) является одним из наиболее чувствительных методов атомного анализа, вследствие эффективности и надежности ИСП как источника атомных ионов. Несмотря на то, что для создания ИСП могут быть использованы различные газы: N_2, O_2, He, Ne, воздух, чаще всего для ее генерации выбирают аргон. Этот газ химически инертен, что сводит к минимуму образование нежелательных молекулярных ионов при атомном анализе. Однако соединения аргона все же присутствуют в плазме. При этом если даже небольшое количество атомов аргона образует молекулярные ионы с другими компонентами плазмы, то, учитывая высокую плотность аргона в ИПС, они начинают заметно влиять на масс-спектр [1]. Наиболее часто помехи создают аргидные ионы, такие как Ar_2^+, ArH^+ и ArO^+, которые включают фоновые ионы Ar^+, H^+ и O^+. Эти ионы характерны для ИПС-МС анализа. Помехи, возникающие при образовании соединений Ar с ионами M^+ из элементов в матрице, менее заметны, но могут также приводить к значительным осложнениям. В работе [2] проведены исследования большого числа многоатомных ионов аргона, с целью лучшего понимания фундаментальных процессов в ИПС, связанных с их обилием в масс-спектре. 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 практически 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. В этих случаях возникает необходимость использования в расчетах разного вида негармонических потенциалов межатомного взаимодействия. Ранее нами были рассчитаны термодинамические функции для двухатомных соединений аргона с кобальтом и ванадием ($ArCo^+$, ArV^+) [3] и димеров аргона (Ar_2, Ar_2^+).

Молекула гидрида аргона относится к так называемым ридберговским молекулам. Данный вид молекул имеет слабосвязанное основное состояние и устойчивые возбужденные электронные состояния. Энергия диссоциации ArH составляет всего 44 $см^{-1}$ [4]. Расчет высокого уровня энергий межатомного взаимодействия для основного и тринадцати ридберговских состояний проведен в работе [4] методом MR-AQCC. Результаты расчета представлены в виде набора значений потенциала без аппроксимации их гладкими теоретическими кривыми.

В настоящей работе мы выполнили расчет внутренней статистической суммы ArH только для основного состояния, значения потенциальной энергии которого были взяты из [4] и интерполированы с помощью сплайнов. Возбужденные состояния при расчете термодинамических функций не учитывались, так как энергия первого возбужденного состояния высока 49711 $см^{-1}$ [4], и в выбранном диапазоне температур эти состояния не дают существенного вклада в статистическую сумму.

Положительный ион ArH+ изучен более полно, чем молекула ArH, так как в основном электронном состоянии является стабильной молекулой с энергией диссоциации 32460 $см^{-1}$ [5], поэтому его гораздо проще обнаружить и исследовать экспериментально, чем рассмотренную выше ридберговскую молекулу ArH.

В 2014 году были экспериментально исследованы ИК-спектры поглощения высокого разрешения [6]. Эти данные позволили в 2016 г. получить эмпирический потенциал межатомного взаимодействия для основного состояния ArH+ [5]. Авторы использовали 458 спектральных переходов шести изотопов иона ArH+ с уровней с колебательными квантовыми числами u < 7 из работы [6]. Далее была проведена аппроксимация этих данных методом наименьших квадратов для получения модельного потенциала в виде модифицированного потенциала Морзе MLR3:

$$V(r) = D_{\mathrm{e}}\left[1-\frac{u_{\mathrm{LR}}(r)}{u_{\mathrm{LR}}(r_{\mathrm{e}})}e^{-\phi_{\mathrm{MLR3}}(r)y_{\mathrm{p}}(r,r_{\mathrm{e}})}\right]^2, \tag{16}$$

где функции, входящие в модель потенциала, определены следующим образом:

$$u_{LR}(r) = D_4^{\mathrm{ind}}(r)\frac{C_4^{\mathrm{ind}}}{r^4} + D_6^{\mathrm{ind}}(r)\frac{C_6^{\mathrm{ind}}}{r^6} + D_8^{\mathrm{ind}}(r)\frac{C_8^{\mathrm{ind}}}{r^8}, \tag{17}$$

$$\phi_{\mathrm{MLR3}}(r) = \left[1-y_m(r,r_{\mathrm{ref}})\right]\sum_{k=0}^{N}\phi_k y_q(r,r_{\mathrm{ref}})^k + y_m(r,r_{\mathrm{ref}})\phi(\infty), \tag{18}$$

$$y_p(r,r_{\mathrm{e}}) = \left(\frac{r^p - r_{\mathrm{e}}^p}{r^p + r_{\mathrm{e}}^p}\right), \quad y_m(r,r_{\mathrm{ref}}) = \left(\frac{r^m - r_{\mathrm{ref}}^m}{r^m + r_{\mathrm{ref}}^m}\right), \quad y_q(r,r_{\mathrm{ref}}) = \left(\frac{r^q - r_{\mathrm{ref}}^q}{r^q + r_{\mathrm{ref}}^q}\right), \tag{19}$$

$$\phi(\infty) = \ln\left(\frac{2D_{\mathrm{e}}}{u_{\mathrm{LR}}(r_{\mathrm{e}})}\right), \;\; D_n^{\mathrm{ind}} = \exp\left[-\exp(d_1 - d_2 r)\right]. \tag{20}$$

Внутренние статистические суммы были рассчитаны методикой описанной в [2]. По рассчитанным данным были получены зависимости основных термодинамических функций от температуры.

Литература

1. *Witte T.M., Houk R.S.* Metal argide (MAr+) ions are lost during ion extraction in laser ablation-inductively coupled plasma-mass spectrometry // Spectrochimica Acta Part B. 2004. V. 69. P. 25–31.
2. *Houk R.S., Praphairaksit N.* Dissociation of polyatomic ions in the inductively coupled plasma // Spectrochimica Acta Part B. 2001. V. 56. P. 1069.
3. *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.
4. *Kirrander A., Child M.S., Stolyarov A.V.* Ab Initio and Quantum-defect Calculations for the Rydberg State of ArH // Phys. Chem. Chem. Phys. 2006. V. 8. P. 247.
5. *Coxon J.A., Hajigeorgiou P.G.* Accurate Internuclear Potential Energy Functions for the Ground Electronic States of NeH+ and ArH+ // J. Mol. Spectrosc. 2016. V. 330. P. 63.
6. *Cueto M., Cernicharo J., Barlow M.J., Swinyard B.M., Herrero V.J., Tanarro I., Domenech J.L.* New Accurate Measurement of 36ArH+ and 38ArH+ Ro-vibrational Transitions by High Resolution IR Absorption Spectroscopy // Astrophys. J. Lett. 2014. V. 783. L. 5.

УДК 533.9.01

Влияние нелинейного экранирования на термодинамику комплексной плазмы

И.А. Мартынова, И.Л. Иосилевский

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Обсуждается модификация приближения Дебая–Хюккеля в корреляционной полости («дыре») для двухкомпонентной системы [1] высокоасимметричных зарядов в комплексной плазме с учетом эффекта нелинейного экранирования. В результате решения уравнения Пуассона–Больцмана в неэлектронейтральной корреляционной полости рассчитаны параметры нелинейного экранирования макроионов в ячейке. Обнаружено два эффекта [2] в результате расчета: (1) – приближенное 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. Используется более адекватная, чем в работе [1], формула для расчета энергии кулоновского взаимодействия. Показано, что с учетом эффекта нелинейного экранирования энергия кулоновского взаимодействия заметно отличается от той же энергии в приближении Дебая–Хюккеля в корреляционной полости для двухкомпонентной системы [1] высокоасимметричных зарядов. Работа проводится при поддержке Программы Президиума РАН «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии».

Литература

1. *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.
2. *Martynova I.A., Iosilevskiy I.L.* Non-linear screening and phase transitions of complex plasma // Contrib. Plasma Phys. 2018. V. 58. N 2–3. P. 203–208.

УДК 537.525.5

Испарение и ионизация составляющих смесевого катода из CeO_2 и Cr в диффузной вакуумной дуге для задач плазменной сепарации ОЯТ

***Р.А. Усманов*[1,2], *А.Д. Мельников*[1,2], *В.П. Полищук*[1], *И.М. Ярцев*[1]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН

[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)

Перспективным способом перевода конденсированного вещества в плазменное состояние для целей развивающегося сегодня метода плазменной сепарации отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) [1] является вакуумный дуговой разряд с диффузной катодной привязкой. Этот тип разряда позволяет генерировать стационарный бескапельный поток плазмы катодного материала со значением среднего заряда тяжелых частиц, близким к единице, что продемонстрировано как для металлов [2], так и для оксидов [3]. Существенный интерес для технологии плазменной сепарации представляет испарение и ионизация смесей, моделирующей ОЯТ, в условиях изучаемого источника плазмы.

В данной работе компонентами модельной смеси выступают CeO_2 и Cr, исследовавшиеся ранее по отдельности. Диоксид церия моделирует испарение и ионизацию диоксида урана – основную составляющую наиболее распространенного типа ОЯТ [4]. Металлический хром используется в качестве слабо эмитирующей электроны добавки к оксиду (отношение потока испаряющихся атомов к потоку электронов термоэмиссии $\sim 10^2 >> 1$ [5]). Давления насыщенных паров CeO_2 и Cr соотносятся между собой таким образом, что активное испарение Cr при нагреве (достижение давления около 100 Па, достаточного для реализации дугового разряда) начинается на ~ 300 К раньше, чем для CeO_2 [6]. Это обстоятельство сходно с тем фактом, что в ОЯТ присутствуют продукты распада урана: Cs и Sr, давление пара которых значительно выше, чем у UO_2 [6].

Рабочая смесь перед экспериментом предварительно спекалась в вакууме в рабочем катодном молибденовом тигле при температуре ≈ 1,7 кК. Массовое соотношение CeO_2 и Cr в исходной смеси было близко к единице, общая закладываемая масса ~ 5 г. В результате спекания образовывалась однородная таблетка достаточно высокой плотности. Тигель с таблеткой нагревался с помощью электронно-лучевого подогревателя (ЭЛП) мощностью до 1,5 кВт. При этом скоростным яркостным пирометром измерялась температура – T_c на боковой поверхности тигля. После достижении T_c = 1,95–2,05 кК, соответствующей давлению пара у поверхности катода на уровне 100 Па, на электроды дуги подавалось рабочее напряжение, приводящее к пробою промежутка и к зажиганию разряда. Анодом служила молибденовая радиоционно-охлаждаемая пластина, расположенная на расстоянии 3 см от тигля и имеющая центральное отверстием диаметром 1,5 см для выхода плазмы в заанодное пространство. В экспериментах помимо параметров разряда (тока и напряжения) измерялась температура T_c и средняя скорость испарения катодной смеси в разряде. Зондовым методом измерялась температура и концентрация электронов плазмы на расстоянии около 7 см за анодом. Компонентный состав плазмы определялся по ее спектрам излучения в области длин волн 300–900 нм.

В результате серии экспериментов были определены температурные режимы работы смесевого катода вакуумной дуги, при различных токах разряда и мощностях ЭЛП, когда излучение плазмы было представлено преимущественно линиями хрома. Также найдены параметры разряда ($I > 50$ А, $T_c > 2{,}1$ кК), при которых по данным спектральной диагностики происходит совместное испарение и ионизация компонентов катода. Средняя скорость испарения катодной смеси в дуге лежала в диапазоне 0,6–2 мг/с. Типичные значения температуры и концентрации электронов в заанодной плазме составляли 0,.3–0,5 эВ и 10^{10} см$^{-3}$ соответственно. При этом зафиксированные значения температуры электронов согласуются с экспериментальными оценками по относительной интенсивности линий в плазме внутри разрядного промежутка.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 14-29-00231.

Литература

1. *Ворона Н.А., Гавриков А.В., Самохин А.А., Смирнов В.П., Хомяков Ю.С.* О возможности переработки ОЯТ и РАО плазменными методами // Ядерная физика и инжиниринг. 2014. Т. 5. С. 944–951.

2. *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.
3. *Usmanov R.A., Amirov R.K., Gavrikov A.V., Liziakin G.D., Polistchook V.P., Samoylov I.S., Smirnov V.P., Vorona N.A., Yartsev I.M.* Diffuse vacuum arc on cerium dioxide hot cathode // Phys. Plasmas. 2018. V. 25. P. 063524.
4. *Давиденко Н.Н., Куценко К.В., Тихомиров Г.В, Лаврухин А.А.* Обращение с отработавшим ядерным топливом и радиоактивными отходами в атомной энергетике: учебное пособие. М.: МИФИ, 2007. 136 с.
5. *Полищук В.П., Сердюкова О.К., Ярцев И.М.* О параметрах, определяющих характеристики вакуумных дуг на катодах из различных материалов // Журнал технической физики. 1993. Т. 63. С. 66–74.
6. Физические величины: справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

УДК 533.924

Активное броуновское движение частиц с модифицированной поверхностью в плазменно-пылевом монослое при воздействии лазерного излучения

Е.А. Кононов, М.М. Васильев, О.Ф. Петров

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

Представлены результаты экспериментального исследования характера движения частиц меламин-формальдегида (MF) с модифицированной поверхностью в плазменно-пылевом монослое при воздействии лазерного излучения.

Эксперименты проводились в плазме емкостного высокочастотного (ВЧ) разряда. В результате обработки полученных экспериментальных видеоданных об эволюции пылевой подсистемы после экспозиции в ВЧ-разряде при воздействии лазерного излучения были определены координаты частиц для каждого момента времени, их траектории и скорости. На основе полученных данных были восстановлены парные корреляционные функции и средние кинетические энергии движения макрочастиц, проведены оценки эффективного параметра неидеальности Г* [1], проведены измерения среднего квадратичного смещения и линейного смещения вдоль и поперек вектора скорости движущихся пылевых частиц.

Экспериментально наблюдался фазовый переход «кристалл–жидкость» в монослое пылевых частиц MF после экспозиции в плазме емкостного ВЧ-разряда. Предложено объяснение фазового перехода с учетом роли фотофоретической силы в движении макрочастиц. Влияние фотофоретической силы связано с модификацией поверхности пылевых частиц в плазме, в результате которой частицы могут эффективно поглощать лазерное излучение [2].

Экспериментально обнаружено, что воздействие лазерного излучения на монослой из модифицированных частиц MF приводит к увеличению среднего квадратичного смещения движущихся пылевых макрочастиц, что означает уменьшение связи между заряженными пылевыми частицами в монослое. Обнаружено, что динамика движения модифицированных частиц меламин-формальдегида в монослое изменяется при различной мощности лазерного излучения и соответствует трем режимам: удержание ловушкой, броуновское движение и комбинированное самодвижение, состоящее из лазерно-индуцированного (фотофорез) и броуновского движения.

Результаты анализа траекторий модифицированных пылевых частиц в плоскости монослоя при воздействии лазерного излучения подтверждают полученные в результате анализа среднего квадратичного смещения данные.

Экспериментально установлено, что при воздействии лазерного излучения на плазменно-пылевой монослой из модифицированных частиц MF величина линейного смещения вдоль вектора скорости движения макрочастиц растет, в то время как величина линейного смещения поперек вектора скорости движения макрочастиц остается постоянной и в пределах погрешности равна 0. Таким образом, можно сделать вывод [3], что частицы MF с модифицированной поверхностью в монослое после экспозиции в плазме емкостного ВЧ-разряда являются активными броуновскими частицами и их активность растет с увеличением мощности лазерного излучения.

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.
2. *Кононов Е.А., Васильев М.М., Петров О.Ф.,* Лазерно-индуцированный фазовый переход в монослое полимерных частиц, левитирующих в газоразрядной плазме низкого давления // ЖЭТФ. 2018. Т. 153. вып. 5. С. 721–725.
3. *Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C. and Volpe G.* Active Particles in Complex and Crowded Environments // Rev. Mod. Phys. 2016. 88 045006.

УДК 533.9.072

Исследование тягово-энергетических характеристик плазменных актуаторов при пониженном давлении

И.В. Трифанов[1,2], В.М. Бочарников[1]

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

Симметричные актуаторы, создающие диэлектрический барьерный разряд, можно использовать для управления подъемной силой крыла. Под воздействием сильного электрического поля происходит ионизация окружающего газа и его ускорение в направлении, перпендикулярном поверхности актуатора, что приводит к образованию синтетической струи, направленной по нормали к поверхности крыла в заданной области. Для большего эффекта воздействия синтетической струи на обтекание поверхности крыла и подъемную силу с наименьшими затратами энергии тяга должна быть наибольшей при меньших затратах энергии. При атмосферном давлении есть много информации о зависимостях тяги синтетической струи [1, 2]. При уменьшении давления изменяется объем плазменного листа [3].

В данной работе было проведено исследование зависимости погонной тяги и удельной тяги по мощности синтетических струй симметричных актуаторов с различной конфигурацией от давления в интервале 50–750 торр. Схема симметричного актуатора изображена на рис. 1. На рис. 2a показаны зависимости погонной тяги синтетической струи от давления для актуаторов с разным расстоянием между внешними электродами *d*. Можно заметить, что при увеличении расстояния между внешними электродами положение максимума сдвигается в область более низких давлений. Такая же тенденция наблюдается и для зависимости удельной тяги по мощности от давления (рис. 2b). Максимум погонной тяги говорит о том, что струя создает максимальное усилие. Максимум удельной тяги по мощности, что актуатор наиболее эффективно преобразует электрическую энергию в энергию струи.

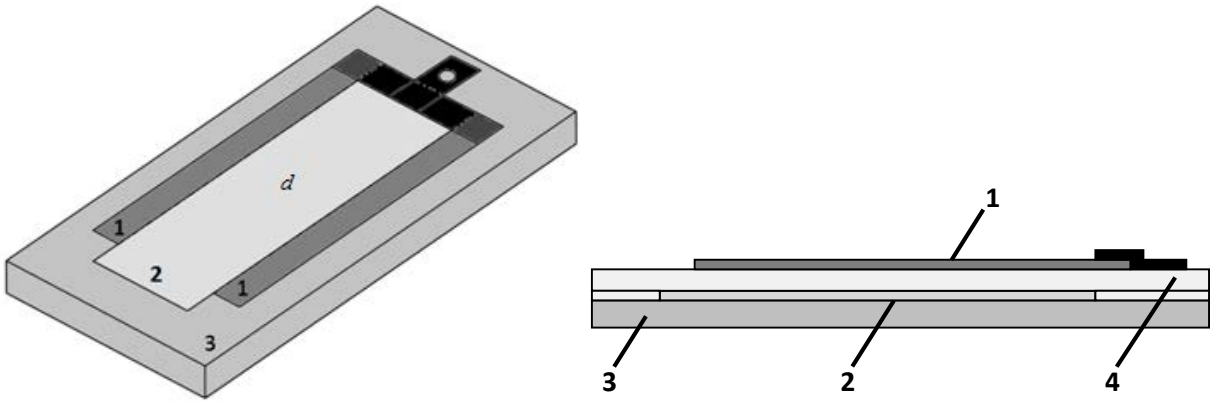


Рис. 1. Схема симметричного актуатора. Актуатор монтировался на диэлектрической пластине (3). Материал пластины гетинакс или текстолит. На диэлектрическую пластину наклеен инкапсулированный электрод (2). Поверх инкапсулированного электрода располагается слой диэлектрика (4). Материал диэлектрика (2) лавсан, его толщина 350 мкм. Поверх диэлектрика наклеены внешние электроды (1). Материал электродов

алюминий толщиной 50 мкм. Ширина внешних электродов 10 мм., ширина инкапсулированного электрода равна расстоянию между внешними электродами (*d*)

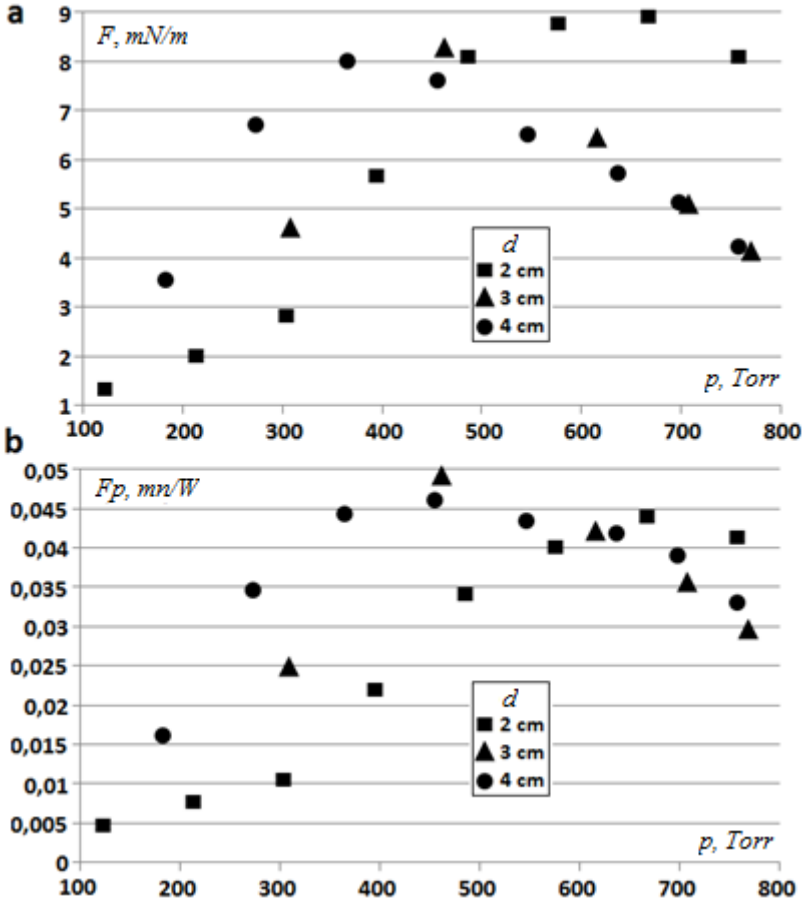


Рис. 2. Зависимости погонной тяги (a) и удельной тяги по мощности (b) от давления при различных расстояниях между внешними электродами *d*

Литература

1. *Glazyrin F.N.* [*et al.*]. PIV analysis of the homogeneity of energy deposition during development of a plasma actuator channel //Technical Physics Letters. 2016. V. 42. N 1. P. 63–66.
2. *Бочарников В.М., Володин В.В., Голуб В.В.* Плазменные струи, создаваемые диэлектрическим барьерным разрядом симметричного актуатора //Успехи прикладной физики. 2017. Т. 5. № 6. С. 559.
3. *Starikovskiy A.* [*et al.*]. Dielectric barrier discharge control and thrust enhancement by diode surface //52nd Aerospace Sciences Meeting. 2014. P. 0144.

УДК 533.9.072

Исследование электрических характеристик плазменных актуаторов при различных давлениях

Д.Г. Серебряков[1,2]***, В.М. Бочарников***[1]

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

Для управления обтеканием крыла летательного аппарата можно использовать диэлектрический барьерный разряд (ДБР), создаваемый с помощью плазменного актуатора [1]. Данный способ имеет свои границы применимости, например, скорость полета должна быть не более 25 м/с, а $Re \sim 10^4$. Такие условия достижимы при полетах беспилотных летательных аппаратов на высоте порядка 20 км. С увеличением высоты изменяется давление и плотность окружающего

воздуха. Большинство существующих на данный момент работ были проведены при атмосферном давлении [2, 3].

В настоящей работе исследованы электрические характеристики ДБР при пониженном давлении. Были разработаны методы измерения емкости актуатора, индуктивности системы «источник–актуатор–ДБР» и электрической емкости разряда. Определены зависимости резонансной частоты и коэффициента диссипации системы, КПД разряда. Результаты показывают, что при уменьшении давления КПД разряда существенно увеличивается (рис. 1).

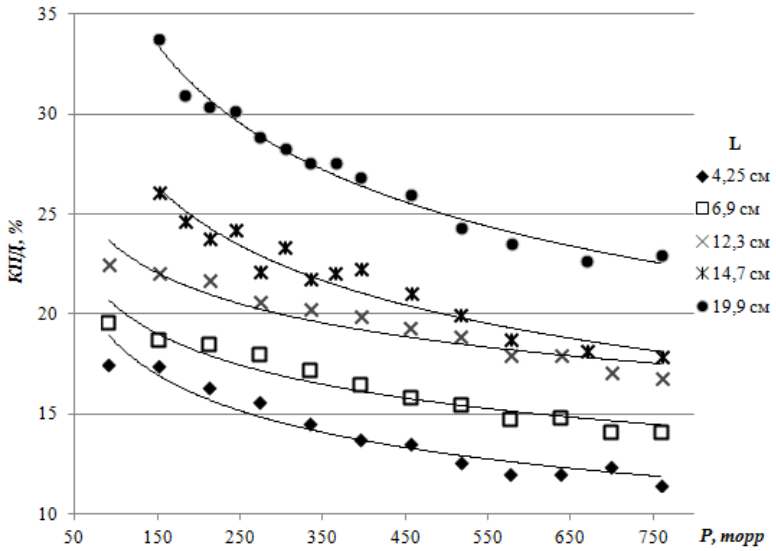


Рис. 1. Зависимость КПД заряда на резонансной частоте от давления для актуаторов с различной длиной внешних электродов (*L*)

Литература

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. *Benard N., Moreau E.* EHD force and electric wind produced by plasma actuators used for airflow control // 6th AIAA Flow Control Conference. 2012. P. 3136.
3. *Glazyrin F.N.* [*et al.*]. PIV analysis of the homogeneity of energy deposition during development of a plasma actuator channel // Technical Physics Letters. 2016. V. 42. N 1. P. 63–66.

УДК 536.7

Согласованная интерпретация динамических экспериментов для молибдена в окрестности кривых плавления и испарения

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 необходимым для получения достоверной информации фундаментального характера, позволяющей строить широкодиапазонные уравнения состояния (УРС), и для решения множества прикладных 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 т.д., и, в частности, для численного моделирования разнообразных процессов и явлений физики высоких плотностей энергии. 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.

Одним из экспериментальных методов является метод изобарического расширения (IEX), используемый для изучения теплофизических свойств металлов и для калибровки полуэмпирического УРС в области расширенного жидкого вещества. Однако имеются серьезные расхождения в существующих экспериментальных данных для тугоплавких металлов при давлениях в несколько килобар. Интерпретация этих экспериментов затруднена из-за сложности лежащих в основе физических явлений.

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) [1], но также учитывает движение ионов. В настоящее время в расчетах могут использоваться более 1000 атомов [2–5], что позволяет изучать неупорядоченные системы и даже фазовые переходы [2,5]. Это делает КМД перспективным методом для описания теплофизических свойств вещества в широком диапазоне параметров.

В данной работе представлены КМД расчеты термодинамических свойств твердого и жидкого молибдена в окрестности кривых плавления и испарения. Данныq металл является тугоплавким и благодаря своим свойствам имеет важное прикладное значение. Вычисления *ab initio* используются для последовательного описания экспериментальных данных об ударном сжатии образцов пористого металла и последующего изоэнтропического расширения в преграды из различных материалов, а также всех доступных экспериментальных данных по изобарическому расширению. Для выполнения первопринципного моделирования используется программный код VASP [6].

Эта работа была проведена в Объединенном институте высоких температур РАН при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-79-00346).

Литература

1. *Martin R.M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
2. *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 l. 104. P. 185701.
3. *Pozzo M., Desjarlais M.P., Alf`e D.* Electrical and thermal conductivity of liquid sodium from first-principles calculations // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 054203.
4. *Alf`e D., Pozzo M., Desjarlais M. P.* Lattice electrical resistivity of magnetic bcc iron from first-principles calculations // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 024102.
5. *Pozzo M., Alf`e D.* Melting curve of face-centered-cubic nickel from first-principles calculations // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 024111.
6. *Kresse G., Hafner J.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558.

УДК 533.922

Торрефикация биомассы в неподвижном слое минерального наполнителя – метод повышения калорических характеристик биотоплива

К.С. *Мельникова*[1,2], *А.Д. Голубков*[2]

[1] Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
[2]Объединённый институт высоких температур РАН

Использование биомассы в качестве топлива является стратегической задачей в связи с необходимостью решения ряда экологических проблем. Однако существенным недостатком биомассы по сравнению с ископаемыми видами топлива, например углем? является ее низкая энергетическая плотность. Для повышения калорических характеристик биомассы применяют технологию торрефикации – процесс низкотемпературного пиролиза биомассы при отсутствии или

ограниченном содержании воздуха. Перспективным видом торрефикации является низкотемпературный пиролиз биомассы в неподвижном слое минерального наполнителя [1].

Основной целью данной работы является анализ влияния температуры, состава и высоты минерального слоя на энергию выхода биомассы. Для экспериментального исследования использовались сосновые пеллеты диаметром 6 мм и длиной 20–55 мм. Торрефикацию пеллет осуществляли в неподвижном слое минерального наполнителя (бентонитовая глина или карбонат кальция). Пеллеты помещались на дно стакана и засыпались минеральным наполнителем до определенной высоты. Биомасса вместе с минеральным наполнителем нагревалась в муфельной печи до заданной температуры в течение 10 минут. Время торрефикации принадлежало диапазону от 30 до 60 минут. По окончании процесса торрефикации образцы извлекались из печи и охлаждались до комнатной температуры. Для исходных и торрефицированных образцов биомассы определялся элементный состав (табл. 1), на основе которого рассчитывалась наивысшая теплота сгорания биомассы [2].

На основе полученных экспериментальных данных можно сделать следующие выводы: при увеличении высоты слоя бентонита наблюдается рост энергии выхода биомассы (рис. 1а), но при этом коэффициент повышения *HHV* уменьшается (рис. 1б). Подобные результаты обусловлены тем, что при увеличении высоты минерального слоя уменьшается диффузионный поток кислорода к биомассе, что приводит к подавлению окислительных реакций. Из-за снижения скорости окислительных реакций увеличивается содержание кислорода в биомассе (сравни опыты 7–9, табл. 1), поэтому коэффициент повышения *HHV* уменьшается.

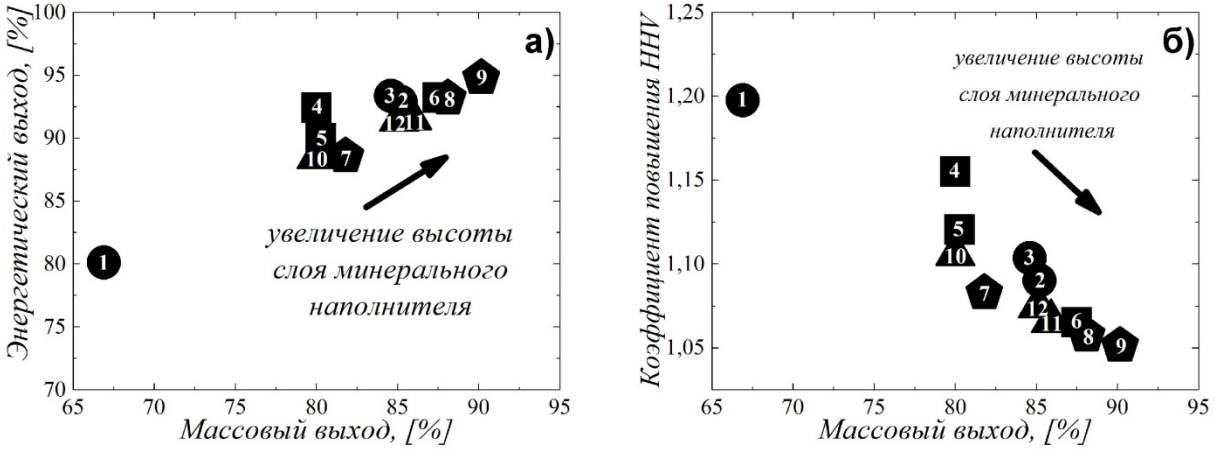


Рис. 1. Зависимость энергии выхода биомассы (а) и коэффициента повышения *HHV* (б) от массового выхода (номера на рисунке соответствуют табл. 1)

Таблица 1

Влияние температуры, высоты и состава минерального слоя на элементный состав биомассы

	Температура, °C	*Высота и тип минерального наполнителя*	*Элементный анализ (%)*				
			C	H	O	N	S
0	Необработанный	-	47.88	6.33	45.68	0.09	0.02
1	270	3 см, бентонит	58.06	5.73	36.11	0.08	0.02
2	270	6 см, бентонит	52.01	6.24	41.68	0.06	0.01
3	270	9 см, бентонит	52.58	6.24	41.11	0.06	0.01
4	270	3 см, $CaCO_3$	56.32	5.70	37.88	0.07	0.03
5	270	6 см, $CaCO_3$	54.13	5.95	39.85	0.06	0.01
6	270	9 см, $CaCO_3$	51.12	6.17	42.64	0.06	0.01
7	250	3 см, бентонит	52.19	6.06	41.68	0.06	0.01
8	250	6 см, бентонит	51.22	6.02	42.69	0.06	0.01
9	250	9 см, бентонит	50.58	6.16	43.20	0.06	0.01
10	250	3 см, $CaCO_3$	53.96	5.79	40.17	0.08	0.01
11	250	6 см, $CaCO_3$	51.82	5.94	42.18	0.06	0.00
12	250	9 см, $CaCO_3$	52.35	5.88	41.72	0.05	0.00

Литература

1. *Leontiev A., Kichatov B., Korshunov A., Kiverin A., Medvedskaya N., Melnikova K.* Oxidative torrefaction of

briquette birch shavings in the bentonite // Energy, 165, 2018. P. 303–313.
2. *Channiwala S.A., Parikh P.P.* A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuels // Fuel, 81, 2002. P. 1051–1063.

УДК 533.9.03

Условия устойчивости плазменно-пылевых цепочек в газовом разряде постоянного тока с переменной полярностью

И.И. Лисина, Е.А. Лисин

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединённый институт высоких температур РАН

Недавно в ходе экспериментов на установке ПК-4 («Плазменный кристалл–4») в условиях микрогравитации были обнаружены нитевидные плазменно-пылевые структуры, формирующиеся благодаря особому типу взаимодействий между микрочастицами, индуцированному полем разряда постоянного тока с переменной полярностью [1].

В большинстве теоретических работ, посвященных исследованию условий возникновения нитевидных (цепочечных) пылевых структур в плазме, рассматриваются системы с невзаимным межчастичным взаимодействием, которое возникает при фокусировке ионного потока за пылевой частицей. В ряде работ рассматривается возникновение плазменно-пылевых цепочек за счет сильной анизотропии внешнего удерживающего поля.

В данной работе мы рассматриваем условия и критерии устойчивости для цепочечной кластерной системы нескольких частиц, взаимодействующих с симметричным парным потенциалом с дальнодействующим притяжением взаимодействием. Были получены аналитические критерии для развития неустойчивости в цепочечных кластерных структурах, состоящих из трёх, четырёх, пяти заряженных частиц. Полученные соотношения были апробированы посредством численного моделирования.

Работа была поддержана Министерством образования и науки (грант МК-2930.2017.8).

Литература

1. *Ivlev A.V., Thoma M.H., Rath C., Joyce G., Morfill G.E.* // Phys. Rev. Lett. 106, 155001.

УДК 532.529:541.182

Эффективная вязкость суспензии Paramecium caudatum в водном растворе полимера

В.С. Судаков[1,2]***, Е.Е. Коршунова***[1]***, О.Ф. Петров***[1,2]

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

Активные частицы преобразовывают энергию внешнего поля или химическую энергию топлива в кинетическую энергию поступательного и вращательного движения. В качестве активных частиц могут выступать искусственные частицы или живые микроорганизмы. Подобные системы демонстрируют весьма нетривиальные свойства, связанные с образованием динамических неравновесных структур. Динамика активной материи во многом определяется ее эффективной вязкостью [1]. Результаты экспериментов показывают, что эффективная вязкость суспензии микроорганизмов в воде во многом зависит от механизма их передвижения [2, 3]. Представляет интерес проанализировать эффективную вязкость суспензии одноклеточных организмов (*Paramecium caudatum*) в водном растворе полимера. В качестве полимера в данной работе использовался сложный эфир целлюлозы (*Natrosol* 250). Характерный размер *Paramecium caudatum* принадлежал диапазону от 100 до 300 мкм, а их скорость в воде достигала 2 мм/с. Измерения вязкости проводились при помощи капиллярного реометра Оствальда.

Эффективная вязкость суспензии *Paramecium caudatum* в воде в зависимости от концентрации микроорганизмов представлена на рис. 1.

При увеличении концентрации микроорганизмов возрастает подвижность одного слоя жидкости относительно другого, что способствует снижению эффективной вязкости суспензии (участок *ab*, рис. 1). При дальнейшем увеличении концентрации микроорганизмов, наблюдается рост вязкости (участок *bc*, рис. 1). Эту область условно можно назвать «турбулентной вязкостью». Рост эффективной вязкости здесь связан с переносом импульса в поперечном направлении по отношению к направлению течения основного потока жидкости. При дальнейшем увеличении концентрации микроорганизмов наблюдается снижение вязкости, что, по всей видимости, обусловлено ламинаризацией потока. При большой концентрации активных частиц они начинают перемещаться когерентным образом. Последующее увеличение вязкости (участок *def*, рис. 1) обусловлено стерическими факторами из-за взаимодействия активных частиц.

Совершенно иной характер эффективной вязкости в зависимости от концентрации микроорганизмов наблюдается в водном растворе полимера (рис. 2). При изменении концентрации микроорганизмов эффективная вязкость имеет максимум.

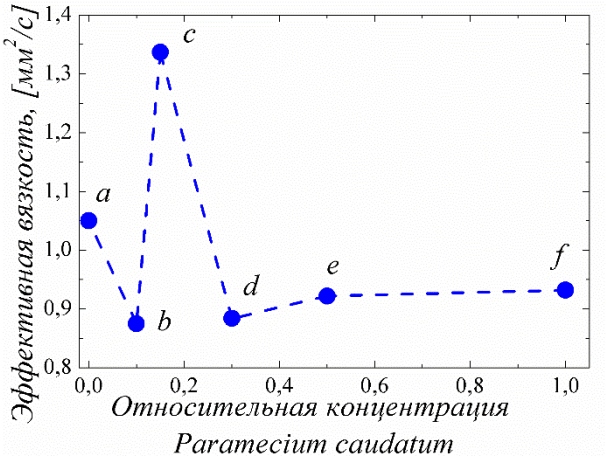


Рис. 1. Зависимость эффективной вязкости *Paramecium caudatum* в воде от концентрации микроорганизмов

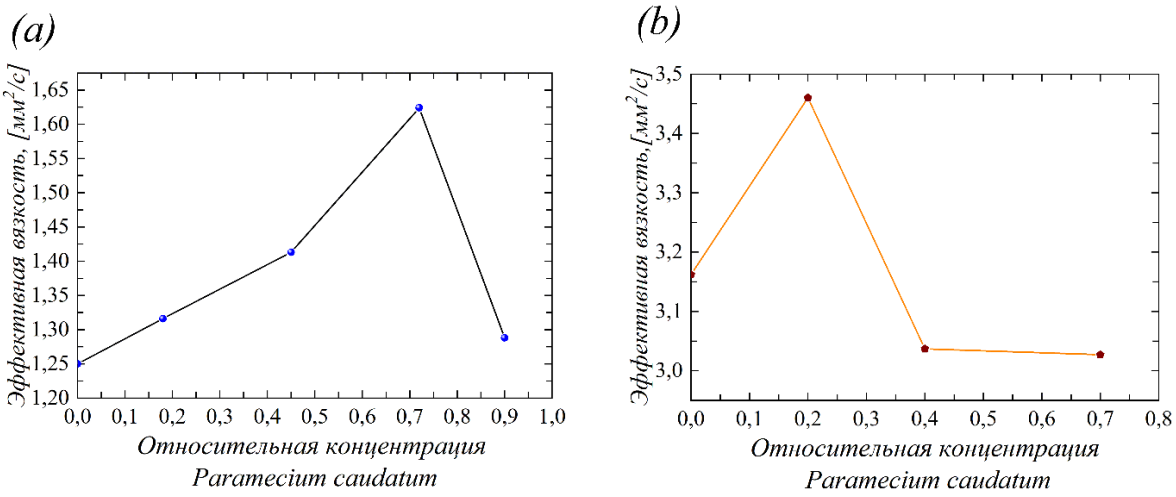


Рис. 2. Зависимость эффективной вязкости суспензии микроорганизмов в водном растворе полимера от концентрации микроорганизмов: (*а*) содержание *Natrosol* 250 4 г/л; (*б*) 12 г/л

Литература

1. *Hatwalne Y., Ramaswamy S., Rao M., Simha R.A.* Rheology of active-particle suspensions // Phys. Rev. L. 2004. V. 92. P. 118101.
2. *Rafai S., Jibuti L., Peyla P.* Effective viscosity of microswimmer suspensions // Phys. Rev. L. 2010. V. 104. P. 098102.
3. *Sokolov A., Aranson I.S.* Reduction of viscosity in suspension of swimming bacteria // Phys. Rev. L. 2009. V. 103. P. 148101.

УДК 533.9.082

Определение сил межчастичного взаимодействия в плазменно-пылевых цепочках в условиях микрогравитации

***Е.А. Лисин*[1,2], *К.Б. Стаценко*[2], *А.Д. Усачев*[2], *А.М. Липаев*[2], *В.И. Молотков*[2], *О.Ф. Петров*[1,2], *М.Ю. Пустыльник*[3], *Х.М. Томас*[3], *М. Тома*[4]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Объединённый институт высоких температур РАН
[3]Институт физики материалов в космосе, Немецкий аэрокосмический центр (DLR)
[4]Физический институт, Юстус-Либигский университет

Одной из важных экспериментально нерешенных задач в пылевой плазме является пространственная структура кильватерного поля, возникающего в результате 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.

Для анализа межчастичного взаимодействия в плазменно-пылевых структурах в условиях микрогравитации были использованы экспериментальные данные, полученные на установке «Плазменный кристалл–4» (ПК-4), находящейся на борту Международной космической станции (МКС). Эксперименты проводились в аргоновом разряде постоянного тока величиной 1 мА с переменной (с частотой 500 Гц) полярностью [1] при давлении 50 Па. В разряд инжектировались монодисперсные микрочастицы из меламин-формальдегида диаметром 3,4 мкм, которые самоорганизовывались в анизотропную структуру, представляющую собой одну или несколько плазменно-пылевых цепочек. Цепочечная структура является наиболее удобной с точки зрения экспериментального исследования пространственной структуры кильватерного поля. Преимущество многочастичной цепочки заключается в том, что она позволяет видеть пространственную асимптотику производных силы взаимодействия на расстояниях от ~ 1 до нескольких межчастичных [2]. Динамика частиц в структуре регистрировалась с помощью видеокамеры высокого разрешения. В результате обработки полученных в ходе эксперимента видеоданных с помощью оригинального программного обеспечения были определены траектории броуновского движения пылевых частиц в плазме.

Полученные траектории позволили изучить взаимодействие между пылевыми частицами, а также внешние электрические силы, действующие на частицы со стороны ловушки. Для этого были измерены корреляции скоростей и смещений частиц в цепочечной структуре. Далее с помощью корреляционного анализа, описанного в работе [2], были определены производные сил межчастичного взаимодействия и внешних сил.

Все авторы выражают благодарность совместному эксперименту ESA и Роскосмоса «Плазменный кристалл-4» на борту Международной космической станции. Работа была частично поддержана Министерством образования и науки (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. *Lisin E.A., Vaulina O.S., and Petrov O.F.* // Physics of plasmas. 2018. 25. 013702.

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Председатель: Л.А. Большов (акад. РАН)

Зам. председателя: П.С. Кондратенко (д.ф.-м.н., профессор)

Секретарь: И.Г. Обухова

Дата: 20.11.2018

Время: 10:00

Место: Москва, ул. Большая Тульская, д. 52, ауд. 112, ИБРАЭ РАН

УДК 621.039

Сравнение квазиодномерной и двухмерной моделей процесса «самопогружения» тепловыделяющего шара

О.О. Корчагина

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

С целью обобщения рассматриваются две квазиодномерные модели процесса «самопогружения» тепловыделяющего шара. В первой работе [1] при $\varphi = \pm\pi/2$ (рис. 1.) толщина расплава δ стремится в бесконечность, что не соответствует экспериментальным данным. Во второй [2] введен угол θ, что позволяет учесть реальную поверхность расплава и получить физические значения для δ, но не учитывается мощность источника тепловыделения. Обобщение производится путем внедрения мощности источника тепловыделения в алгоритм решения, описанный в [2].

Была получена следующая система [2]:

$$\frac{dp^*}{d\varphi} = \frac{12U^*\int_0^{\varphi}\sin\varphi\cos\theta d\varphi}{\delta^{*3}\sin\varphi}, \quad (1)$$

$$\delta^* = \frac{f(Ste)\cos(\varphi-\theta)}{U^*\cos\theta}, \quad (2)$$

$$F^* = 2\pi\int_0^{\pi/2} p^*\cos\varphi\sin\varphi d\varphi, \quad (3)$$

$$\frac{d\delta^*}{d\varphi} = (R+\delta^*)\tan(\varphi-\theta), \quad (4)$$

здесь φ – нормальный угол к поверхности шара, θ – нормальный угол к поверхности раздела фаз, $Ste = c_p(T_W - T_m)/L_m$, $F(Ste) = \sqrt{9Ste^2 + 280Ste + 400} - 3Ste - 20)/4$, $L_m = L + c_p(T_0 - T_m)$, L – скрытая теплота плавления, c_p – удельная теплоемкость среды, T_W – температура поверхности шара, T_m – температура плавления среды, T_0 – температура среды на бесконечности. Уравнения (1) – (4) описывают плавление вокруг шара, вызванное разностью температур между поверхностью шара и окружающей породой. Граничные условия $p^* = 0$ при $\varphi = \pm 90^o$ и $\varphi = 0$.

При $\varphi = \theta$ решение будет следующим:

$$p^* = \frac{3U^*(\cos\varphi)^4}{2f^3(Ste)}, \quad (5)$$

$$\delta^* = \frac{f(Ste)}{U^*\cos\varphi}, \quad (6)$$

$$F^* = \frac{\pi U^{*4}}{2f^3(Ste)}, \quad (7)$$

Уравнения (5) – (7) являются основными результатами, полученными в работе [1]. Система (1) – (4) аналитически неразрешима, в работе [2] описывается алгоритм решения данной системы, основанный на итерационном методе. Чтобы учесть мощность источника тепловыделения, в алгоритме T_W заменяется на свою зависимость от мощности источника тепловыделения и радиуса следующим образом [3]:

$$T_W = T_m + \frac{4}{3}\frac{1}{\alpha c_p}\left(\frac{\mu\rho_H^4 H^4 R^5}{2g\Delta\rho L_m \rho^4}\right)^{1/3}, \quad (8)$$

где μ – динамическая вязкость расплава, ρ – плотность расплава, ρ_H – плотность сферы, $\Delta\rho = \rho_H - \rho$, α – температуропроводность среды. В [2] T_W задавалась как некоторый параметр.

Для проверки работы обобщенного алгоритма построены зависимости $U_e(H)$ и $U_a(H)$ для $R = 1.5$, где U_e – скорость, полученная из работы [1], U_a – скорость, рассчитанная с помощью модифицированного алгоритма (рис. 2).

Далее сравниваются обобщенная квазиодномерная и двухмерная модели процесса «самопогружения» тепловыделяющего шара. В качестве главного параметра для сравнения результатов используется температура поверхности шара T_W. Для одномерной модели значение T_W получено из формулы (8), для двухмерной T_W моделируется расширенным методом энтальпий с гладкой функцией индикатора фаз при использовании приведенных в [4] схем дискретизации и алгоритма PIMPLE.

Произведено обобщение квазиодномерных моделей «самопогружения» шара, учитывающее мощность теплового источника. Проведены расчеты по двухмерной модели. Произведено сравнение результатов, полученных согласно квазиодномерной и двухмерной постановкам. Установлено, что температуры поверхности шара T_W, полученные с помощью разных моделей, отличаются на 15%.

Таблица 1

Значение температура поверхности шара

Двухмерная модель	$T_W(-0.1) \approx 1732.5\ K$
Квазиодномерная модель	$T_W(-0.1) \approx 1474.2\ K$

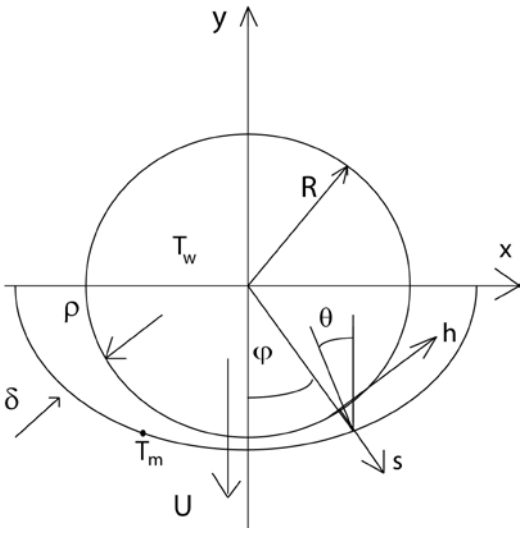


Рис. 1. Физическая модель.

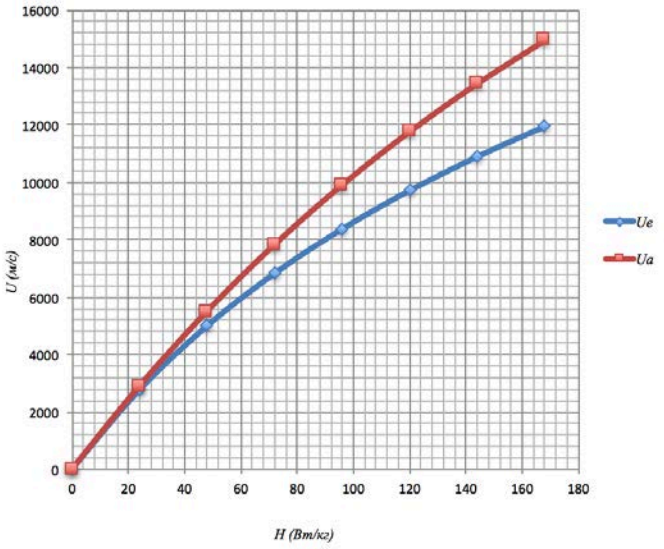


Рис. 2. Зависимости $U_e(H)$ и $U_a(H)$ для $R = 1{,}5$ м.

Литература

1. *Emerman S.E., Turcotte D.L.* Stoke's problem with melting // Heat Mass Transfer. 1983. V. 26, N 11. P. 1625–1630.
2. *Chen W. Zhu B., Chen Z., Li H, Sun F.* New analysis of contact melting of phase change material around a hot sphere // Heat Mass Transfer. 2008. N 44. P. 281–286.
3. *Корчагина О.О.* Анализ процесса погружения тепловыделяющего шара под действием силы тяжести // Сборник трудов XVIII научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН. 2017 С. 94–97.
4. *Tobias Holzmann*. Mathematics, Numerics, Derivations and OpenFOAM(R), *Holzmann* CFD, Leoben, fourth edition, February 2017. URL www.holzmann-cfd.de.

УДК 532.685

Перенос примеси в трещиновато-пористой среде, содержащей редкие случайные включения, сорбирующие примесь

А.Л. Матвеев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Известно, что перенос примеси в неоднородных средах с сильно контрастными свойствами часто не описывается классическими закономерностями [1, 2]. Вместо этого реализуются аномальные режимы переноса, такие как суб- и супердиффузия, квазидиффузия. Более того, при неизменных свойствах среды режим переноса может меняться во времени [3].

В работе [4] были рассмотрены режимы переноса примеси в насыщенной влагой статистически-однородной трещиновато-пористой среде. Такую среду можно представить в виде совокупности пористых блоков, разделенных трещинами. Перенос растворенной в воде примеси в этой среде обусловлен двумя механизмами: молекулярной диффузией и адвекцией. В силу слабой проницаемости блоков перенос примеси по ним определяется только диффузией, а в трещинах имеет место как адвекция, так и диффузия. В [4] было показано, что в зависимости от интервала времени реализуются режимы адвекции-диффузии, режим квазидиффузии в продольном и субдиффузии в поперечном направлениях и режим замедленной адвекции диффузии (см. [4]).

В настоящей работе рассмотрен случай, когда в среде имеются редкие, случайно расположенные в пространстве включения, способные сильно адсорбировать примесь.

Уравнение переноса в трещинах для концентрации c, усредненной на масштабах, существенно превышающих характерные размеры блоков и расстояния между включениями, имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} + div\left(\vec{u}c - D\nabla c\right) = Q_1 + Q_2, \tag{1}$$

где $\vec{u}$ – средняя скорость адвекции, D – коэффициент дисперсии, а

$$Q_\alpha = \psi_\alpha \frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \varphi_\alpha\left(t-t'\right)c\left(t'\right)dt', \quad \alpha = 1,2, \tag{2}$$

описывает обмен примесью между трещинами и пористыми блоками ($\alpha = 1$) и между трещинами и сорбирующими включениями ($\alpha = 2$). ψ_2 есть доля объема, занимаемая включениями, $\psi_2 << 1$. $\psi_1 = 1 - \psi_2 \approx 1$. В работе [4] было показано, что подынтегральное ядро в (2) имеет универсальный вид на малых и больших временах. Например, в представлении Лапласа для него справедливо

$$\varphi_\alpha\left(p\right) \approx \begin{cases} \sqrt{\dfrac{p}{t_{a\alpha}}} & pt_{b\alpha} >> 1, \\ p\sqrt{\dfrac{t_{b\alpha}}{t_{a\alpha}}} & pt_{b\alpha} << 1. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь $t_{a\alpha}$ и $t_{b\alpha}$ – характерные времена системы, которые выражаются через характерные размеры блоков R_α, коэффициент диффузии примеси в блоках, пористость φ_α в них и трещиноватость среды φ_{fr}, а также коэффициент сорбции примеси во включениях K.

Режимы переноса характеризуются полным числом частиц, содержащихся в трещинах, средним смещением облака частиц примеси и дисперсией в продольном (вдоль средней скорости) и поперечном направлениях. На рис. 1 и 2 схематически изображены зависимости от времени числа частиц в трещинах и их среднего смещения при следующих значениях параметров:

$\psi_2 \approx 0{,}1$, $R_2 \approx 10R_1$, $K \approx 10^2$, $\varphi_1 \approx \varphi_2 \approx 0{,}1$, $\varphi_{fr} \approx 10^{-3}$.

Сами зависимости имеют следующий вид:

при $t_a \ll t \ll t_{b1}$: $N\left(t\right) \cong N_0\sqrt{\dfrac{t_a}{\pi t}}$, $\left\langle r_\parallel \right\rangle \cong \sqrt{\sigma_\parallel^2} \cong \sqrt{D_u t}$, $\sigma_\perp^2 \cong \sqrt{D\sqrt{t_a t}}$, где $D_u = u^2 t_a$;

при $t_{b1} \ll t \ll t_{b1}\left(\dfrac{\Psi_1}{\Psi_2}\right)^2$: $N\left(t\right) \cong N_0 \dfrac{1}{\Psi_1}\sqrt{\dfrac{t_a}{t_{b1}}}$, $\left\langle r_\parallel \right\rangle \cong \sqrt{\sigma_\parallel^2} \cong ut\dfrac{1}{\Psi_1}\sqrt{\dfrac{t_a}{t_{b1}}}$, $\sigma_\perp^2 \cong \dfrac{Dt}{\Psi_1}\sqrt{\dfrac{t_a}{t_{b1}}}$;

при $t_{b1}\left(\dfrac{\Psi_1}{\Psi_2}\right)^2 \ll t \ll t_{b2}$: $N\left(t\right) \cong N_0 \dfrac{1}{\Psi_2}\sqrt{\dfrac{t_a}{\pi t}}$, $\left\langle r_\parallel \right\rangle \cong \sqrt{\sigma_\parallel^2} \cong \dfrac{1}{\Psi_2}\sqrt{\dfrac{t_a}{t_{b1}}}\sqrt{D_u t}$, $\sigma_\perp^2 \cong \dfrac{Dt}{\Psi_2}\sqrt{\dfrac{t_a}{t_{b1}}}$;

при $t \gg t_{b2}$: $N\left(t\right) \cong N_0\left(\Psi_2 A_2 + \Psi_1 A_1\right)^{-1}$, $\left\langle r_\parallel \right\rangle \cong \sqrt{\sigma_\parallel^2} \cong ut\left(\Psi_2 A_2 + \Psi_1 A_1\right)^{-1}$, $\sigma_\perp^2 \cong Dt\left(\Psi_2 A_2 + \Psi_1 A_1\right)^{-1}$.

Здесь $A_\alpha = \sqrt{\dfrac{t_{b\alpha}}{t_a}}$, для заданных параметров $t_{a1} = t_{a2} = t_a$.

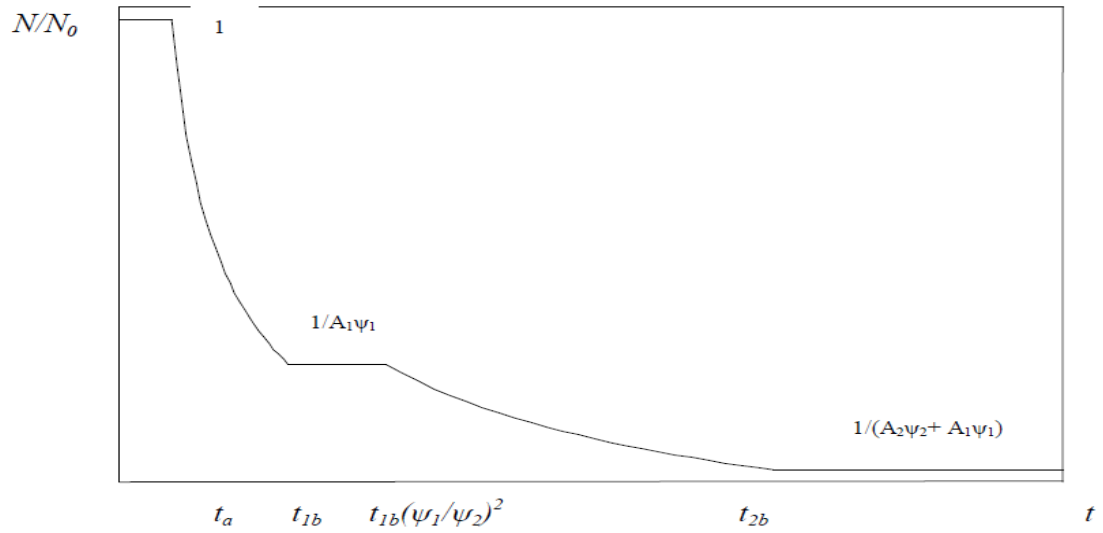


Рис. 1. Зависимость числа частиц в трещинах в различных интервалах времени

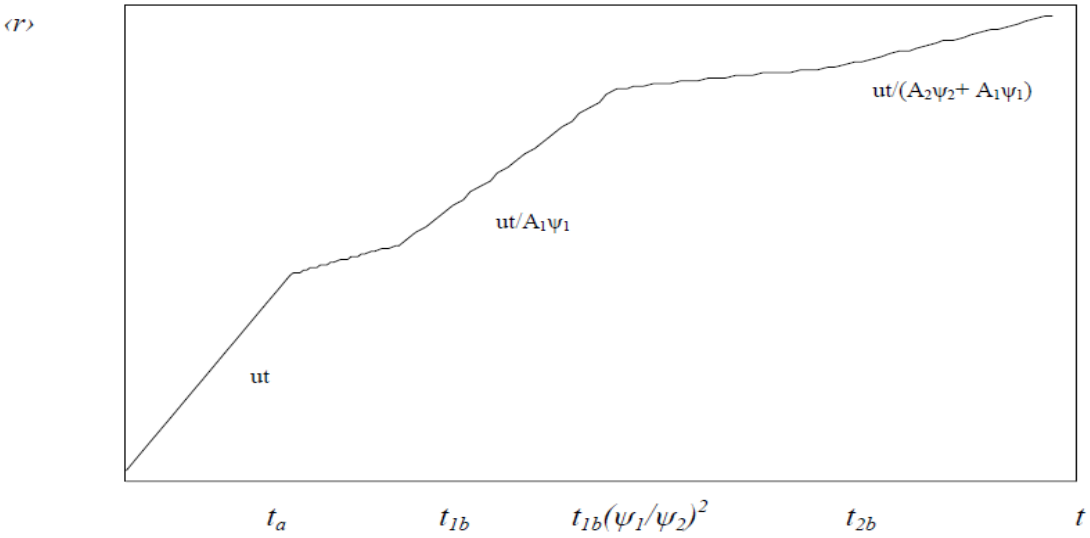


Рис. 2. Зависимость среднего смещения примеси на различных интервалах времени

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-08-1229А).

Литература

1. *Bouchaud J.-P., and Georges A.*, Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications // Phys. Rep. 1990. V. 195. P. 127–293
2. *Isichenko M.B.*. Percolation, statistical topography and transport in random media // Rev. Mod. Phys. 1992. V. 64. P. 961–1043
3. *Кондратенко П.С., Матвеев Л.В.*, Асимптотические режимы и структура «хвостов» концентрации в модели Дыхне // ЖЭТФ. 2007. Т. 131. С. 494–499.
4. *Матвеев Л.В.* Перенос примеси в трещиновато-пористой среде с сорбцией // ЖЭТФ. 2012. Т. 142. С. 943–950.

УДК 621.039

Расчетное моделирование выхода активности из негерметичного твэла со сплошными таблетками в условиях облучения на АЭС «Козлодуй»

А.В. Борисов, А.А Сорокин, В.В. Лиханский

АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»

При эксплуатации ядерного топлива возможно нарушение герметичности оболочек твэлов и выход активности в первый контур реактора. Для обоснования радиационной безопасности при эксплуатации ядерного топлива производства кампании АО «ТВЭЛ» на АЭС «Козлодуй» выполняются расчетно-теоретические и экспериментальные исследования поведения модернизированного топлива ВВЭР с таблетками без центрального отверстия. В ходе процедуры контроля герметичности оболочек (КГО) на работающем реакторе на АЭС «Козлодуй» были получены высокие уровни активности продуктов деления в теплоносителе после выхода реактора на мощность в начале кампании [1–2]. После примерно пятидесяти суток работы энергоблока наблюдался существенный спад активности нуклидов йода в теплоносителе. При проведении КГО на остановленном реакторе на АЭС «Козлодуй» была обнаружена одна негерметичная ТВС первого года эксплуатации.

Расчетный анализ, выполненный с помощью аттестованного кода РТОП-СА [3], показал, что наблюдаемый высокий уровень активности можно объяснить наличием вторичного дефекта. Вторичные дефекты в оболочках негерметичных твэлов могут возникать вследствие образования

массивных гидридов. При образовании вторичного дефекта в негерметичном твэле могут возникать условия для ускоренного массопереноса продуктов деления и водорода под оболочкой и их выноса в теплоноситель. Пониженное содержание водорода в твэле с вторичным дефектом может приводить к увеличению скорости окисления топливных таблеток и к дополнительному распуханию топлива. Эксперименты на реакторе МИР [4–5] с твэлами, имеющими искусственный дефект в оболочке, показали повышенное содержание кислорода вблизи открытой поверхности топливных таблеток, соответствующее фазе U_3O_8. Как известно, плотность U_3O_8 меньше плотности диоксида урана, что может приводить к дополнительному распуханию таблеток. Увеличение радиуса топливного сердечника вследствие окисления UO_2 может вызывать повышенную механическую нагрузку на оболочку и образование крупных дефектов в виде продольной трещины, вследствие чего может происходить интенсивных выход продуктов деления и вынос топлива в теплоноситель.

Для описания поведения активности в условиях облучения на АЭС «Козлодуй» модели кода РТОП-СА были модернизированы с учетом образования вторичного дефекта и дополнительного распухания топливных таблеток вследствие окисления. Скорости переноса в твэле с вторичным дефектом и выхода нуклидов в теплоноситель обусловлены перепадом давления по высоте активной зоны и зависят от гидравлического сопротивления канала, образованного системой: первичный дефект – топливный столб – вторичный дефект. В твэле со сплошными таблетками гидравлическое сопротивление топливного столба в значительной степени зависит от величины зазора между топливом и оболочкой. При схлопывании зазора гидравлическое сопротивление топливного столба существенно увеличивается, а массоперенос продуктов деления и водорода и их выход в теплоноситель могут значительно уменьшиться.

Динамика окисления топливных таблеток в негерметичном твэле зависит от переноса кислорода по таблетке. В работе приводятся результаты верификации реализованной в коде РТОП-СА модели переноса кислорода в UO_{2+x} на данных по содержанию кислорода вблизи поверхности таблеток, полученных в ходе экспериментов на реакторе МИР.

По модернизированной версии кода РТОП-СА выполнены расчеты выхода активности из негерметичного твэла в условиях облучения на АЭС «Козлодуй». Показано, что реализованная в коде РТОП-СА модель выхода активности при образовании вторичного дефекта и учет распухания топлива вследствие окисления таблеток позволяют описать наблюдаемое поведение активности.

Литература

1. *Лиханский В.В., Евдокимов И.А.* [*и др.*]. «Расчетный анализ результатов послереакторных исследований негерметичных ТВС. Дополнительная верификация кода РТОП-СА». Тех. отчет ГНЦ РФ ТРИНИТИ № 10/НИР-7193 от 13.06.2017 г.
2. *Евдокимов И.А., Лиханский В.В.* [*и др.*]. Модернизация методов КГО на работающем реакторе для современных типов топлива и топливных циклов. // Международный научно-технический семинар АО «ТВЭЛ» «Опыт эксплуатации ядерного топлива российского производства на АЭС с ВВЭР-1000», Болгария, г. Несебр, 26–30 сентября 2016 г.
3. *Sorokin A., Likhanskii V., Evdokimov I., Zborovskii V., Vilkhivskaya O., Tokarev S., Ulibyshev K.,* Modeling In Support of Experiments in the Mir Reactor for Justification of Fission Products Release from Failed Fuel of Advanced Design and Form (U,Gd)O2 Fuel, // 12th International Conference on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support 16-23 September 2017, Nessebar, Bulgari.
4. *ГНЦ НИАР* Отчет о НИР Послереакторные исследования экспериментального твэга МГ03 «Исследования выхода продуктов деления из необлучённых твэлов модернизированной конструкции типа ВВЭР-1000 с искусственно нанесёнными дефектами в петлевой установке ПВ-1 реактора МИР», Димитровград 2016.
5. *ГНЦ НИАР* Отчет о НИР Послереакторные материаловедческие исследования экспериментального твэла М02 «Исследования выхода продуктов деления из необлучённых твэлов модернизированной конструкции типа ВВЭР-1000 с искусственно нанесёнными дефектами в петлевой установке ПВ-1 реактора МИР», Димитровград 2017.

УДК 621.039.53: 620.179.118

Результаты электрофизического неразрушающего контроля сварных соединений в образцах из сталей

***А.И. Алвахеба*[1], *В.Г. Бекетов*[1], *О.В. Иванов*[2], *Т.Е. Иванова*[2], *В.И. Сурин*[1]**

[1]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[2]ООО «Техноскан»

Модельные образцы из стали были изготовлены с использованием различных способов сварки. В сварные соединения искусственно введены такие структурные нарушения, как несплавление корня шва, непровар корня шва, несплавление по разделке шва, скопление пор, отдельные крупные поры и другие.

Получены результаты электрофизического неразрушающего контроля (ЭФК) для шести модельных образцов сварных соединений, прошедших также контроль в испытательной лаборатории ООО «Техноскан» (г. Волгодонск) с применением дополнительного радиографического и ультразвукового НК.

В исследовании решались следующие задачи:

– получение и анализ экспериментальных потенциограмм сканирующей контактной потенциометрии (СКП, [1,2]) в зависимости от качества выполненного сварного соединения на заданном уровне дискриминации сигнала;

– локация структурных нарушений в сварных соединениях методами СКП и радиографического контроля;

– систематизация результатов ЭФК в соответствии с выявленными структурными нарушениями и идентификация выявленных дефектов путем сравнения экспериментальных потенциограмм с результатами радиографического контроля.

При измерениях использовалась мобильная информационно-измерительная система, разработанная в лаборатории ElphysLAB НИЯУ МИФИ, размещенная на ноутбуке AsusX554L в паре с мультиметром Agilent 34401A. К контролируемой поверхности касались электрофизическим датчиком, подключенным к измерительной системе. Прижимное усилие преобразователя к поверхности не превышало значения 1 Н. Считывание показаний происходило в автоматическом режиме в течение 2…3 секунд, после чего электрический сигнал передавался в блок программы обработки результатов измерений.

Испытания модельных образцов со сварными соединениями проводились при комнатной температуре как под нагрузкой (с использованием универсальной испытательной машины Р-10М-Авто (рис. 1) и гидравлического испытательного пресса ИП-500М-Авто (рис. 2), так и без нагрузки. Радиографическое исследование сварных соединений выполнено по методике контроля ПНАЭ Г-7-017-89 на оборудовании РАПАН М 200/100. Оценка качества изделий проведена с учетом указанного нормативного документа.

Модельные сварные соединения были изготовлены из сталей сталь 20, Ст3сп, 09Г2С и 12Х18Н10Т. Перед непосредственным проведением измерений была измерена шероховатость поверхности.

Для построения потенциограмм применяли ручное поточечное сканирование по восьми измерительным дорожкам.

На рис. 3 представлены изображения рентгенограммы (в верхней части рисунка) и потенциограммы для образца из стали 12Х18Н10Т. Образец сварен ацетиленовой сваркой из двух стальных пластин толщиной 13,5 мм с размерами 200×200×5 мм. Ширина стыкового сварного шва равна 10 мм. В нижней части рисунка приведены цветовая шкала (градиент) для определения значений разности потенциалов. Эти значения представлены также на рис. 3 в виде чисел возле структурных нарушений (цветовые рефлексы). На потенциограмме показано распределение дефектов внутри сварного соединения для высокого уровня СУС = 4,301, на котором видны непровар шва, мелкие поры, КВС и другие дефекты.

Проведены совместные комплексные исследования специально приготовленных сварных соединений методами радиографического контроля и ЭФК с целью выявления и идентификации дефектов.

Проведена локация структурных нарушений (дефектов) в сварных соединениях методами ЭФК и радиографического контроля;

Сравнительный анализ потенциограмм (на заданном уровне дискриминации) и рентгенограмм показал полное соответствие координат всех выявленных дефектов на рентгенограмме и потенциограмме.

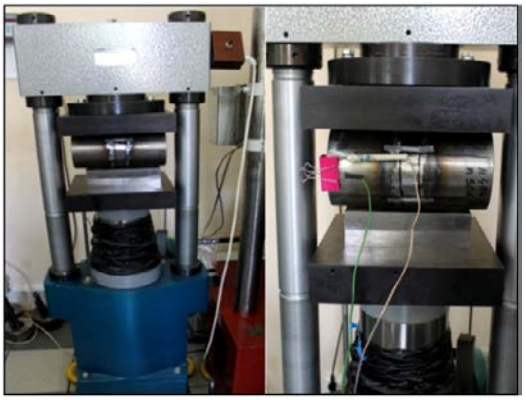


Рис. 1. Испытания образцов из стали 12Х18Н10Т на разрушение на машине Р-10М-Авто



Рис. 2. Испытания образцов на прессе ИП-500М-Авто

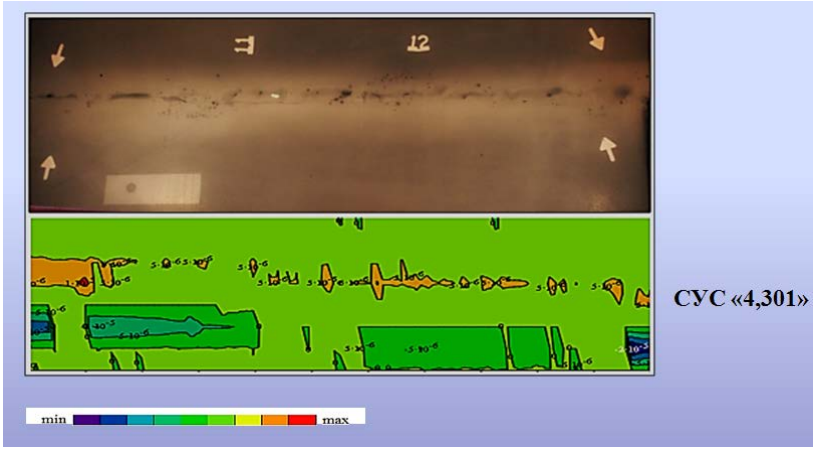


Рис. 3. Рентгенограмма (вверху) и потенциограмма (внизу) для структурного уровня сигнала СУС=4,301

Литература

1. *Surin V.* New potential for potentiometry// Nuclear Engineering International, 2018, 63(765), P.30–32. http://www.neimagazine.com/features/featurenew-potential-for-potentiometry-6146360/
2. *Сурин В.И., Абу Газал А.А., Алвахеба А.И., Шеф Е.А., Бокучава Г.Д., Папушкин И.В.* Расчетно-экспериментальный метод моделирования остаточных напряжений в сварных соединениях// Информационные технологии в проектировании и производстве. М.: ФГУП «Научно-технический центр оборонного комплекса «Компас», 2018 г. № 2. С. 48–55.

УДК 519.688

Модификация эвристического оптимизационного алгоритма Harmony Search в применении к задаче калибровки профильной фильтрационной модели

Д.К. Валетов, Г.Д. Неуважаев, В.С. Свительман

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Современный подход к моделированию фильтрации и миграции в геологической среде, в том числе в задачах обоснования безопасности, – это численное решение уравнений адвективно-дисперсионного массопереноса конечно-разностными методами [1], которое реализуется в специализированных программных средствах [2].

Как и другие задачи, связанные с моделированием сложных природных систем, гидрогеологическое моделирование связано с целым набором неопределенностей, наличие которых является следствием ограниченности исходных данных, неточности измерений и т.д.

Из этих предпосылок возникает задача калибровки – подбора при помощи оптимизационного алгоритма неточно известных параметров таким образом, чтобы минимизировать целевую функцию, характеризующую меру отклонения результатов моделирования от экспериментальных данных в точках наблюдения.

В данной работе рассматривается задача оптимизации параметров модели фильтрации в неоднородной геологической среде. В модели на основе данных опытно-фильтрационных работ [3] решается задача фильтрации в стационарной напорной постановке. В моделируемой среде выделено несколько элементов геологического строения, обладающих различными фильтрационными свойствами. Для каждого элемента геологического строения в ходе калибровки варьируются коэффициенты фильтрации. Также в число варьируемых параметров включены граничные условия: расходы для правой границы моделируемой области и инфильтрационное питание. В качестве данных наблюдений доступно 35 точек с известными напорами по результатам опробований в четырех скважинах с шагом порядка 50 м [3].

В настоящее время для решения оптимизационных задач в различных областях деятельности существует большое количество эвристических алгоритмов, имеющих свои преимущества для различных задач [4]. В данной работе рассматривается модификация хорошо зарекомендовавшего себя оптимизационного метода поиска гармонии (Harmony Search) [5]. Блоксхема алгоритма приведена на рис. 4. Гиперпараметрами, определяющими поведение метода, являются:

- HMS (Harmony Memory Size) – размер стека решений, т.е. «мелодий»;
- HMCR (Harmony Memory Criterion Rate) – вероятность выбрать старую «ноту» – параметр оптимизируемой модели – при построении новой «мелодии», в противном случае решение выбирается равновероятным образом из заданного диапазона;
- PAR (Pitch Adjusting Rate) – вероятность исказить мелодию в случае, когда она берется с прошлой итерации;
- alpha – понижающий множитель для контроля шага при искажении ноты.

Генерация нового решения из стека решений происходит следующим образом: для каждого параметра модели разыгрывается случайное число с равномерным распределением в диапазоне [0, HMS], и из решения с таким номером в стеке выбирается соответствующий параметр. После этого разыгрывается равномерно распределенное число в диапазоне [0,1], и если оно оказывается меньше PAR, то к значению параметра добавляется случайное приращение.

Модификация алгоритма, предлагаемая в данной работе, заключается в применении на описанной стадии выбора параметров из стека решений не равномерное распределение, а нормальное распределение со средним 0 и стандартным отклонением, равным 2/3 HMS. Т.к. такое распределение непрерывное и определено на всей числовой прямой, то в случае получения случайного числа больше HMS предлагается вновь разыграть случайное число, но уже с равномерным распределением на интервале [0, HMS].

Для оценки эффективности модификации алгоритма на описанной выше модели было проведено сравнение [6] с классическим алгоритмом поиска гармонии. Оптимизация для каждого алгоритма многократно начиналась с одних и тех же начальных решений и продолжалась одинаковое время (6000 пусков внешней модели). На рис. 4 представлены усредненные графики зависимости целевой функции (функции ошибки лучшего решения, найденного алгоритмом) от

числа запусков модели. Из полученных графиков видно, что в среднем модифицированный алгоритм находит оптимальное решение быстрее, чем оригинальный.

Таким образом, в работе была реализована модификация оптимизационного алгоритма на основе метода Harmony Search. Модифицированный и оригинальный алгоритмы были применены к задаче калибровки профильной фильтрационной модели и показали хорошее совпадение с имеющимися экспериментальными данными. Предложенная модификация алгоритма для решаемой задачи показала себя более эффективной, чем оригинальный алгоритм. По результатам апробации модифицированный метод Harmony Search был включен в разрабатываемый программный комплекс MOUSE [7].

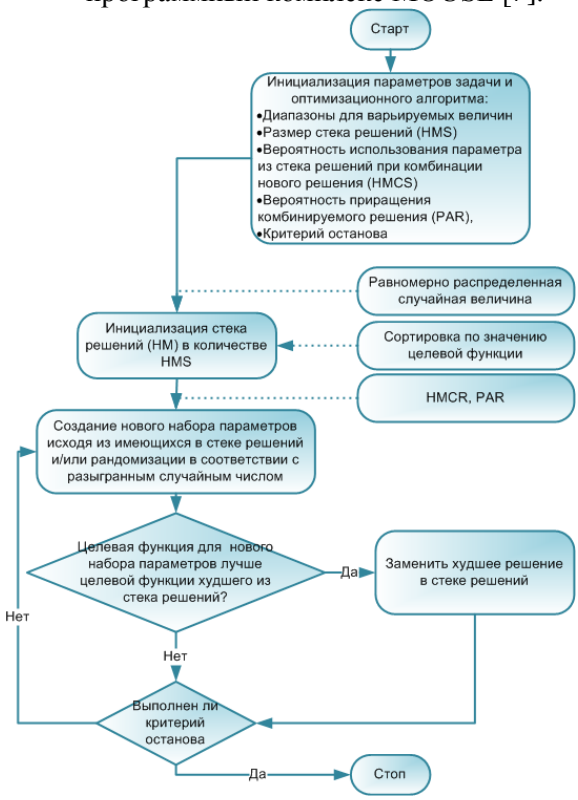


Рис. 3. Блок-схема метода Harmony Search

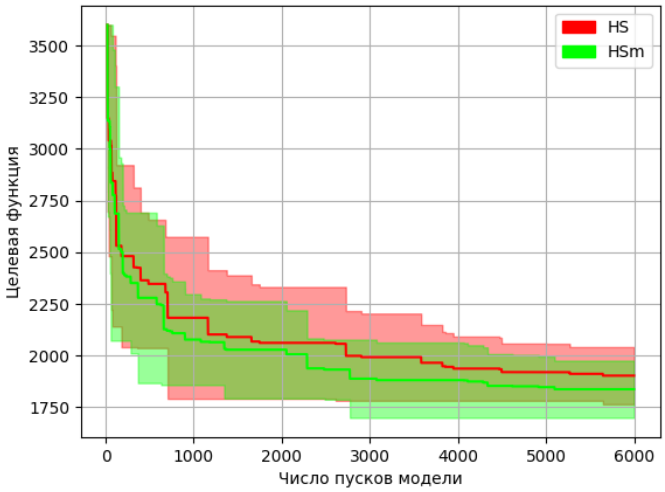


Рис. 4. Сравнение модифицированного алгоритма поиска гармонии (HSm) и классического (HS)

Литература

1. *Румынин В.Г.* Геомиграционные модели в гидрогеологии. СПб.: Наука, 2011.
2. Отчет о верификации и обосновании программного средства «Программа для трёхмерного геофильтрационного и геомиграционного моделирования» (GeRa/V1), Москва, 2017.
3. *Озерский, А.Ю.* Отчет «Геологические исследования (оценочная стадия) объекта окончательной изоляции радиоактивных отходов на Нижне-Канском массиве (участок «Енисейский»)» / А.Ю. Озерский, К.А. Заблоцкий. – Красноярск, ОАО «Красноярскгеология», 2011.
4. *Wolpert D. H., Macready W. G.* No free lunch theorems for optimization //IEEE transactions on evolutionary computation. 1997. V. 1. N 1. P. 67–82.
5. *Tamer Ayvaz M.*. Application of Harmony Search algorithm to the solution of groundwater management models // Advances in Water Resources V. 32, Iss. 6, June 2009, P. 916–924.
6. *Beiranvand V., Hare W., Lucet Y.* Best practices for comparing optimization algorithms //Optimization and Engineering. 2017. V. 18. N 4. P. 815–848.
7. *Савельева Е.А.* Концепция программного комплекса для оценки неопределенности при обосновании безопасности пунктов захоронения РАО / Е. А. Савельева // Ядерная и радиационная безопасность. 2016. № 4(82) С. 1–14.

УДК 519.233

Применение эвристических оптимизационных алгоритмов к задаче поиска источника загрязнения

***Н.Р. Идрисов*[1], *В.С. Свительман*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2] Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

Задача определения источника загрязнения грунтовых вод по данным наблюдений на участках мониторинга играет ключевую роль для контроля распространения загрязнения и последующей разработки схем реабилитации территорий. Так как процессы переноса необратимы, такая задача относится к классу некорректных обратных задач, для решения которых могут быть применены эвристические оптимизационные методы [1].

В данной работе рассматривается искусственная модельная задача с заведомо известным положением источника загрязнения. Такая постановка позволяет исследовать эффективность разных оптимизационных алгоритмов в зависимости от положения источника загрязнения.

Моделируемая область представляет собой однородный напорный водоносный горизонт, заданный в виде прямоугольного участка 1100 × 880 м [2]. Плановая дискретизация расчетной области принимается равномерной, общее количество ячеек 22 × 16, размер каждой ячейки 50 × 50 м. Северная и южная границы моделируемой области полагаются непроницаемыми, на них задается граничное условие второго рода. Поток подземных вод направлен с запада на восток. На западной и восточной границах задается постоянный напор 15 и 10 м соответственно (условие первого рода). Концентрация загрязняющего вещества – 100 мг/л. Поток загрязняющего вещества, поступающего из источника, постоянный в течение времени моделирования и равен 10 $м^3$/сут в течение 15 лет (период – 1 год). В пределах исследуемой области расположены наблюдательные скважины obs1 (525, 275) м, obs2 (525, 375) м, obs3 (525, 475) м, obs4 (725, 275) м и obs5 (725, 475) м. На рис.Рис. 8 показаны схема модельной области и распределение концентрации загрязнителя в результате расчета.

Геофильтрационно-геомиграционная модель реализована при помощи кода MODFLOW [3], численно решающего уравнение для потока подземных вод в пористых средах с использованием метода конечных разностей, и кода MT3DMS [4], в котором выполняется моделирование переноса загрязняющих веществ в потоке подземных вод посредством решения уравнения переноса в частных производных.

Оптимизационная задача формулируется следующим образом. Источник загрязнения задается в точке с известными координатами. Расчет прямой задачи дает значения временных рядов концентраций в пяти точках наблюдения в течение всего периода моделирования. Эти значения далее выступают в роли экспериментальных данных наблюдений.

Процесс оптимизации представляет собой варьирование значений параметров из заданных диапазонов с целью минимизации целевой функции, определяющей различие модельных и экспериментальных концентраций в точках мониторинга. Варьируемые параметры модели – это поток загрязняющего вещества source_rate, его концентрация source_conc и пространственные координаты (X; Y).

В качестве возможных положений источника загрязнения были выбраны 11 различных точек. Для каждой из этих точек была проведена серия оптимизаций с помощью двух методов, реализованных в коде MOUSE [5]: модифицированного алгоритма PSO (Particle swarm optimization), имитирующего социальное поведение птиц в процессе поиска пищи [6], и GWO (Gray Wolf Optimizer), основанного на стратегии поведения волков во время поиска добычи [6]. В качестве показателя качества решения задачи используется процент совпадения найденного положения источника с заранее заданным.

На рис.Рис. 9 представлены результаты оптимизации в виде кружков, задающих положение источника, в каждом из которых показан процент совпадения заданного и найденного положений.

Из полученных результатов видно, что алгоритмы показывают хорошие результаты вдали от границ, однако на краях результат лучше в левой части моделируемой области, что может быть обусловлено несимметричным расположением точек наблюдения. В дальнейшем планируется применение данной методики к реальным данным по загрязнению, и полученные результаты говорят о необходимости проведения анализа неопределенностей при решении такого рода задач.

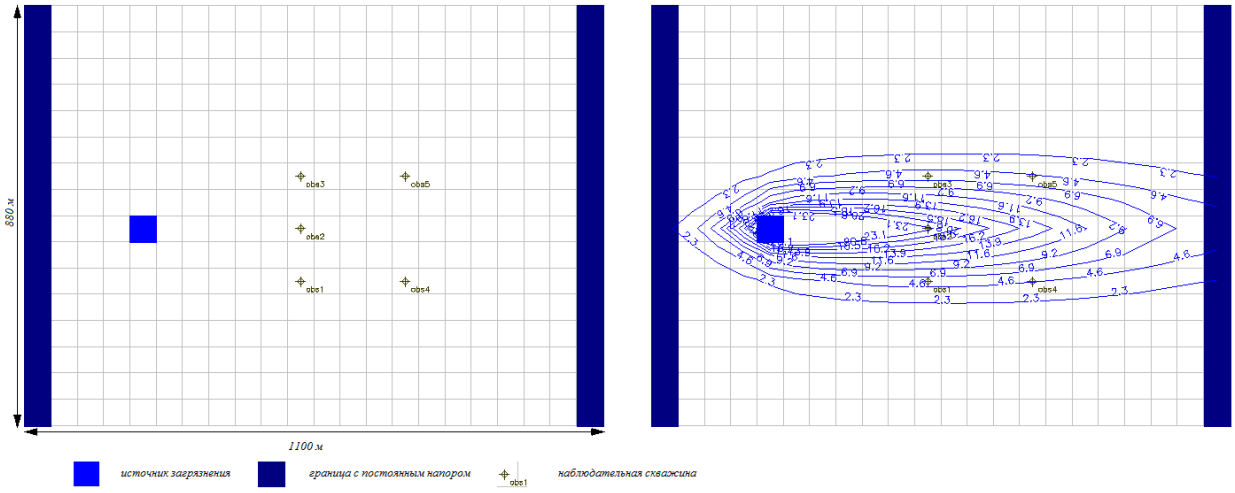


Рис. 8. Схема модельной области (слева) и распределение концентрации загрязнителя, полученное в результате расчета (справа)

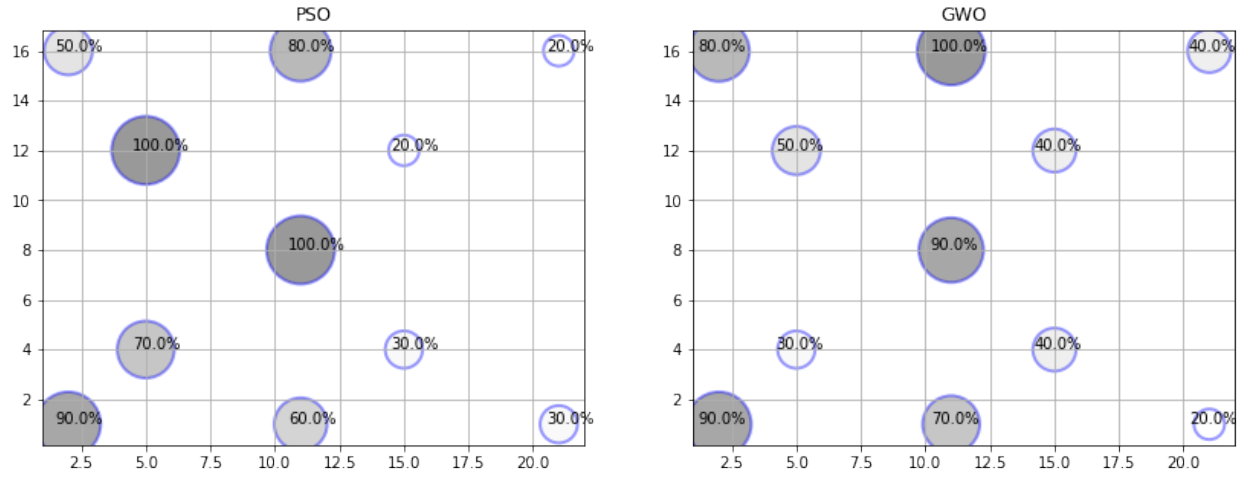


Рис. 9. Результаты нахождения положения источника с помощью PSO и GWO

Литература

1. *Aral M.M., Guan J., Maslia M.L.* Identification of contaminant source location and release history in aquifers //Journal of hydrologic engineering. 2001. V. 6. N 3. P. 225–234.
2. *Трофимова Ю.В., Свительман В.С., Расторгуев А.В.* Определение положения источников загрязнения подземных вод по данным мониторинга // Инженерные изыскания в строительстве. Материалы Тринадцатой Общероссийской конференции изыскательских организаций. — М.: ООО Геомаркетинг, 2017.
3. *Harbaugh A.W.* MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model – the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16, 2005.
4. *Zheng C., Wang P.P. MT3DMS:* a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide. – Alabama University, 1999.
5. *Савельева Е.А.* Концепция программного комплекса для оценки неопределенности при обосновании безопасности пунктов захоронения РАО // Ядерная и радиационная безопасность. 2016 № 4(82) С. 1–14.
6. *Kennedy, J.; Eberhart, R. (1995).* Particle Swarm Optimization. // Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks. P. 1942–1948.
7. *Mirjalili S., Mirjalili S.M., Lewis A.* Grey wolf optimizer //Advances in engineering software. 2014. V. 69. P. 46–61.

СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ

Председатель: А.Н. Лагарьков (акад. РАН, профессор)

Зам. председателя: А.В. Николаев (д.ф.-м.н.)

Секретарь: В.И. Полозов

Дата: 23.10.2018

Время: 9:30-15:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 7, ауд. 106-107 БФК, МФТИ

УДК 537.874

Поглощение электромагнитной волны резонатором на основе диэлектрической пластины

М.Л. Обухов[1]***, А.М. Лебедев***[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Решается задача перевода энергии падающей плоской электромагнитной волны (ЭМВ) в энергию собственной волны диэлектрической пластины на металлической подложке, далее волна должна затухать из-за ненулевых омических потерь в диэлектрике. При преломлении падающей волны на границе диэлектрика не происходит перехода в поверхностную волну, поскольку угол преломления не может быть больше угла полного внутреннего отражения, тогда как фронты, формирующие поверхностную волну, должны двигаться в диэлектрике под углом больше угла полного внутреннего отражения. Поэтому для передачи энергии между электромагнитными волнами разной структуры используется дифракционная решетка, элементы которой размещаются на поверхности пластины по всей её длине с таким периодом, чтобы первый дифракционный максимум решётки "запускал" поверхностную волну в пластине. Удержание ЭМВ в диэлектрической пластине достигается в результате формирования резонатора путём закрытия торцов пластины металлическими стенками и выбора длины пластины, кратной длине волны собственного типа. Тогда на резонансе накопление и последующая диссипация энергии в пластине становятся энергетически выгодными, а подбором уровня потерь в диэлектрике можно изменять интенсивность поглощения волны пластиной.

Полагалось, что диэлектрическая пластина имеет комплексную диэлектрическую проницаемость ε, дифракционная решетка на поверхности пластины выполнена в виде брусков из того же диэлектрика, имеющих квадратное поперечное сечение со стороной много меньше периода решётки d, а ЭМВ падает по нормали к поверхности пластины.

Период дифракционной решётки был взят равным длине собственной волны пластины $d = \lambda_B = 2\pi / \mathrm{Re}(h)$, где h – комплексная постоянная распространения собственной волны пластины. Тогда волна, соответствующая первому дифракционному максимуму решетки, проходит в диэлектрик под тем же углом, под которым в диэлектрике движутся волновые фронты, формирующие собственную волну волновода. Первое приближение для постоянной распространения h находилось как для пластины без дифракционной решётки: в интервале

$$k_0 < \mathrm{Re}(h) < k_0 \cdot \mathrm{Re}(\sqrt{\varepsilon}), \qquad (1)$$

определяемом условиями существования поверхностной волны, из численного решения дисперсионного уравнения

$$\sqrt{h^2+\left(\frac{\pi}{W}\right)^2-k_0^2}-\frac{\sqrt{k_0^2\cdot\varepsilon-h^2-\left(\frac{\pi}{W}\right)^2}}{\varepsilon}\cdot tg\left[\sqrt{k_0^2\cdot\varepsilon-h^2-\left(\frac{\pi}{W}\right)^2}\cdot a\right]. \qquad (2)$$

Здесь k_0 – волновое число, a – толщина пластины. В отличие от дисперсионного уравнения для двумерной задачи в [1], здесь учтена конечная ширина пластины W, а решение (2) для h искалось в виде комплексного числа.

Наличие дифракционной решётки несколько меняет постоянную распространения собственной волны диэлектрической пластины. Поэтому её значение уточнялось в ходе численного решения серии задач дифракции ЭМВ на образце по максимуму резонансных явлений при вариации периода решётки d в окрестности приближения, найденного первоначально.

В расчётах для пластины с действительной частью диэлектрической проницаемости Re(ε) = 2,56 (как у полистирола) на резонансе наблюдалось превышение напряжённости электрического поля стоячей волны в пластине над полем падающей волны (1 В/м) до 50 раз (рис. 1). Основным внешним проявлением резонанса является уменьшение ЭПР образца – в расчётах наблюдалось трёхкратное уменьшение интенсивности обратного рассеяния от образца на резонансе (рис. 2). Более глубокого снижения обратного рассеяния можно ожидать для оптически более плотных диэлектриков, которые при той же толщине пластины в большей степени концентрируют поле внутри диэлектрика.

По глубине минимума обратного рассеяния ЭМВ, получаемого на резонансе для образца предложенного вида, можно сравнивать эффективность возбуждения поверхностной волны разными типами дифракционных решёток, вообще неоднородностями разного рода на поверхности диэлектрика, например, объёмными голограммами, как это предложено в [2].

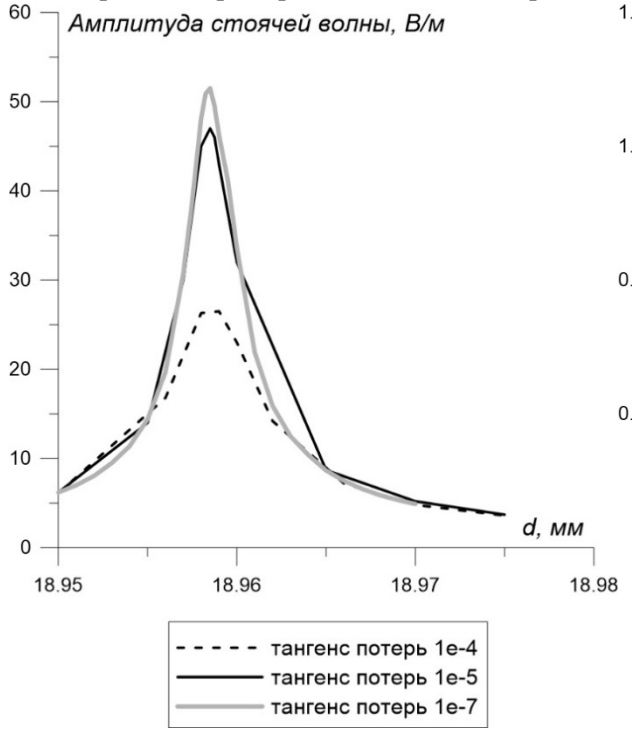


Рис. 1. Зависимость амплитуды стоячей волны от периода дифракционной решётки

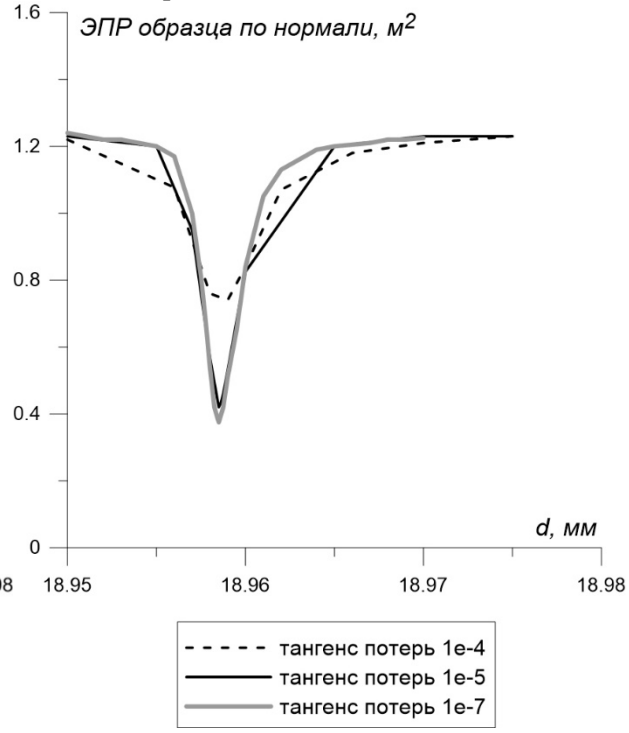


Рис. 2. Зависимость ЭПР образца от периода дифракционной решётки

Литература

1. *Баскаков С.И.* Электродинамика и распространение радиоволн. – М.: Высшая школа, 1992. 416 с.
2. *Ignatov A.I., Merzlikin A.M. //* Opt.Comm., 2018. V. 410. P. 83.

УДК 621.396.969.18

Оптимизация формы контура зеркала коллиматора

***В.С. Солосин*[2], *Д.О.Михеева*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

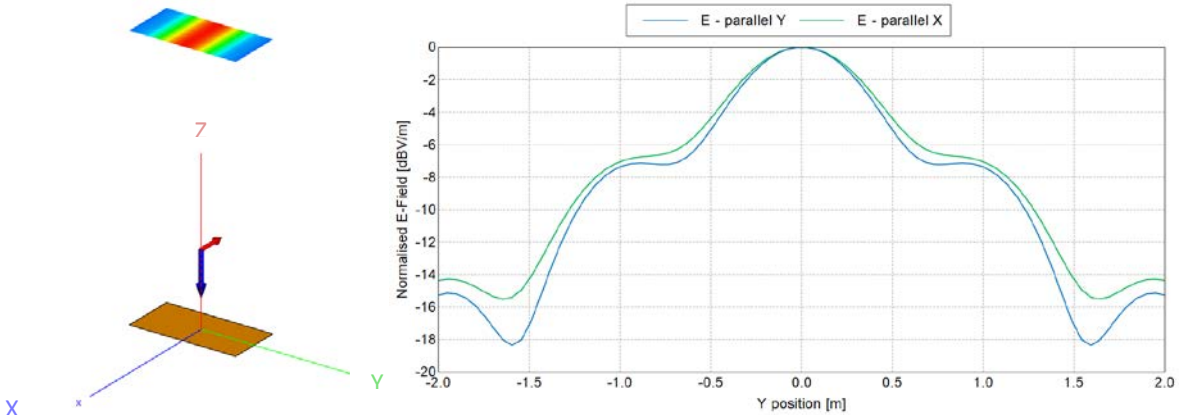
Целью данной работы является оптимизация формы контура зеркала коллиматора компактного полигона.

Компактный полигон – это измерительный комплекс, позволяющий проводить физическое моделирование рассеяния электромагнитных волн в помещении безэховой камеры. Он предназначен для измерения с высокой точностью характеристик рассеяния исследуемых объектов, а также диаграмм направленности и коэффициента усиления антенн. Преимуществом компактного полигона, по сравнению с другими измерительными комплексами, является его компактность, стабильность условий.

Компактный полигон с помощью коллиматора формирует в рабочей зоне безэховой камеры электромагнитное поле, близкое к полю плоской волны. Практически все существующие коллиматоры для компактных полигонов – коллиматоры зеркального типа. Одной из основных причин неравномерности амплитуды и фазы поля в рабочей зоне, особенно в области низких частот, являются дифракционные эффекты на краях зеркала коллиматора. Чтобы уменьшить влияние дифракционных эффектов на поле в рабочей зоне, края зеркала коллиматора выполняют в виде зубцов или плавно отгибают.

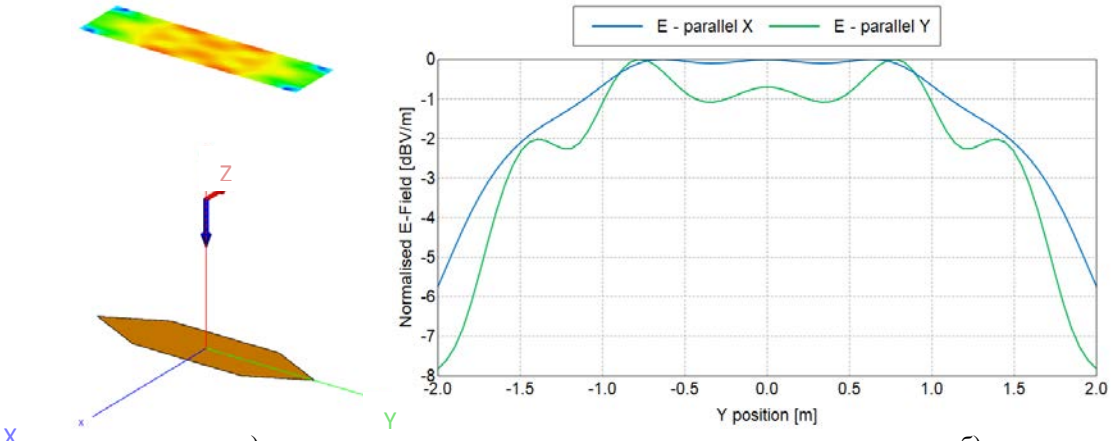
На металлическую пластину падает плоская волна частотой 1 Ггц. На расстоянии 5 м от пластины мы наблюдаем отраженное поле. Были рассмотрены различные формы пластин, показанные на рис. 1а, 2а и 3а. Расчеты были выполнены с помощью программы FEKO. Благодаря возможности использования в этой программе периодических условий реально рассчитывается задача из бесконечной цепочки плотно прижатых по оси X пластин. На графиках представлено распределение поля вдоль оси Y для двух поляризаций вектора E.

Из графиков видно, что добавление зубца (рис. 2б) значительно улучшает распределение амплитуды поля по сравнению с конфигурацией, показанной рис. 1б. Использование зубца с криволинейной формой (рис. 3б) при сохранении его высоты показывает еще лучшую равномерность по сравнению с прямолинейным зубцом. Используя модернизированную форму края зеркала коллиматора, мы смогли уменьшить колебания амплитуды поля в рабочей зоне на 10%. Путем перебора найдена близкая к оптимальной форма зубцов контура зеркала коллиматора.



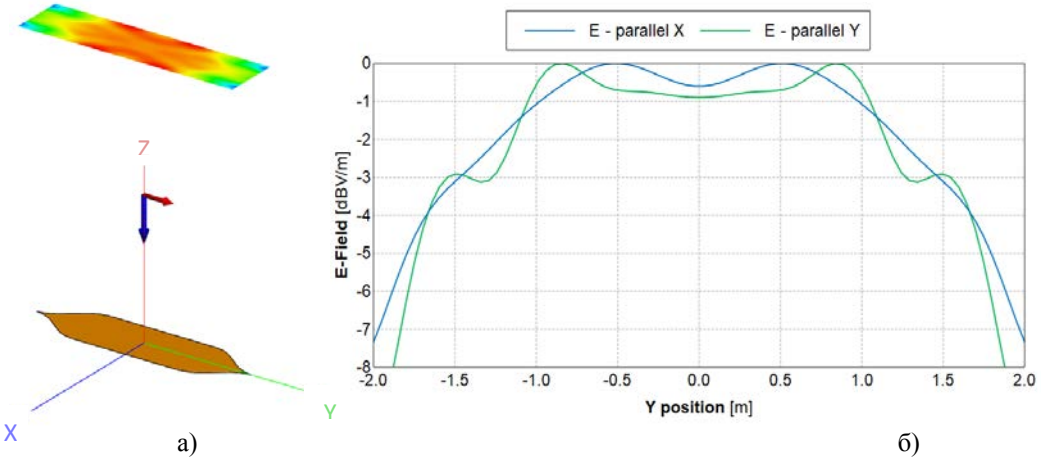
а) б)

Рис. 1. Распределение амплитуды поля, полученного с помощью обычной пластины



а) б)

Рис. 2. Распределение амплитуды поля, полученного с помощью пластины с зубчатым краем



а) б)

Рис. 3. Распределение амплитуды поля, полученного с помощью пластины с модернизированным краем

Литература

1. *Балабуха Н.П., Зубов А.С., Солосин В.С.* Компактные полигоны для измерения характеристик рассеяния. М.: Наука, 2007. 266 с.

УДК 519.254, 004.85

Применение автокодировщика на базе нейронной сети для характеризации наноразмерных шероховатостей

Б.Д. Тонанайский, И.А. Богинская, И.А. Рыжиков, И.Н. Курочкин, И.А. Родионов, А.С. Бабурин, М.В. Седова, Н.Д. Ушаков, А.Д. Аверьянова

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

В связи с важной ролью эффекта гигантского комбинационного рассеяния в задаче раннего обнаружения биомаркеров различных заболеваний возникла необходимость оптимизации параметров поверхности, на которой размещается аналит. Существующие на данный момент методы получения подложек с заданными свойствами либо высоко трудозатратны (пример – нанолитография), что накладывает ограничения на их коммерческую реализацию, либо обладают высокой дисперсией конечных признаков подложки в зависимости от технологических параметров.

Целью эксперимента является применение предложенного алгоритма для извлечения более репрезентативных признаков из поверхностей, полученных методом электронно-лучевого испарения в вакууме с разными технологическими параметрами. Такой подход позволяет уточнить корреляционную связь между значениями параметров при получении подложки и её конечными свойствами. Всего использовано 16 образцов восьми различных типов поверхностей.

В работе предлагается метод характеризации поверхностей со сложной морфологией с помощью методов машинного обучения. Разработан многоступенчатый алгоритм анализа АСМ-снимков серебряных подложек. Приведено сравнение результатов шаблонных методов и значений матричных сверток, выделенных из автокодировщика на базе нейронной сети. Получен результат в виде выделения групп подложек со схожими текстурными особенностями.

Изображения образцов получены путем сканирования подложек с помощью атомно-силового микроскопа. Для каждого типа поверхности произведено пять измерений на трех разных масштабах. Размер каждого снимка 256×256 пикселей. Из каждого изображения случайным образом выделено 30 участков размером 64×64 пикселей так, что в итоге на каждый тип поверхности прошлось 450 экземпляров численных массивов, соответствующих топологии данной поверхности.

Главной особенностью подхода является анализирование участков поверхности на разных масштабах и ориентациях.

В каждом изображении случайным образом выбирается пять участков размера 64×64 пикселей, участок также имеет случайную ориентацию в диапазоне от $-\pi$ до π. Полученные элементы формируют единый набор данных для заданной текстуры. Всего имеется восемь типов поверхностей с различными параметрами производства.

С помощью алгоритма K-means производится разметка изображения на участки с различными параметрами высоты. Оптимальное количество кластеров определяется с помощью «метода локтя».

Для каждой выделенной алгоритмом маски (оптимальное число масок выявлено «методом локтя») рассчитывается ряд характеристик:

1. Средняя высота.
2. Занимаемая площадь.
3. Отношение средней высоты к занимаемой площади (нелинейный признак).
4. Число кластеров.

Признаки выстраиваются по убыванию общей площади, занимаемой кластером. В случае различия количества кластеров отсутствующие значения заполняются нулями.

В связи с наличием двух экземпляров одной и той же поверхности, полученных в разных условиях, но со схожими технологическими параметрами, репрезентативность признаков проверена с помощью кластеризации на восемь кластеров. Целью численного эксперимента являлась проверка того, что один и тот же тип поверхности на разных подложках попадет в один и тот же кластер.

Высокая кучность кластеров на базе довольно простых признаков послужила стимулом к реализации автокодировщика на базе нейронной сети для выявления так называемых «визуальных слов» (скрытых признаков).

Скрытые признаки выделены из внутреннего слоя размером в восемь нейронов, для сравнения с предыдущим методом. Полученные значения сформированы в единый набор данных аналогично предыдущему методу.

После определения характеристик автокодировщиком построено распределение текстур по кластерам способом, описанным выше.

Таким образом, был проведен эксперимент для восьми типов текстур, по два разных образца на каждую. Показано, что характеризация базовыми признаками эквивалентна характеризации на основе автокодировщика. Качество классификации поверхностей выше при использовании выделения скрытых признаков нейронной сетью.

УДК 53.06

Исследование влияния ультразвука при осаждении миоглобина из водных растворов на ГКР-активные подложки

***И.А. Рыжиков*[1], *М.В. Седова*[1], *И.А. Богинская*[1], *К.Н. Афанасьев*[1], *Н.Д. Ушаков*[2], *А.Д. Аверьянова*[2], *Б.Д. Тонанайский*[2]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Для детектирования спектров комбинационного рассеяния растворов белков низких концентраций (менее 10 мкг/мл) необходимо провести пробоподготовку на специальных металлических подложках с наноструктурированной поверхностью, не разрушающую структуру исследуемого объекта и не превышающую отведенного на анализ времени. Выполнение этих условий необходимо для внедрения технологии в массовое использование. Метод ультразвуковой пробоподготовки в резонансном режиме позволит сократить время пробоподготовки раствора белка.

В эксперименте использовали специально созданный стенд для ультразвуковой подготовки, состоящий из генератора, подложкодержателя, пьезоэлементов с различными резонансными частотами (690 кГц, 880 кГц, 90 кГц, 1,7 МГц), системы воздушного охлаждения, термопары. Водный раствор миоглобина объемом 3 мкл с концентрацией белка 10 мкг/мл наносили микродозатором переменного объема Eppendorf на подложки с наноструктурированной поверхностью на основе серебра. Толщина рабочего слоя серебра составляла 100 нм. Подложки были получены методом электронно-лучевого испарения в вакууме с предварительным травлением стеклянной основы в плавиковой кислоте с массовой концентрацией 36%.

Анализ спектров высушенного образца миоглобина проводили с помощью спектрометра комбинационного рассеяния на основе конфокального микроскопа WITec на длине волны возбуждения 785 нм.

Спектры комбинационного рассеяния высушенного белка сравнивали со спектрами контроля (высушенный на воздухе раствор миоглобина на аналогичных подложках). Использование ультразвука позволило сократить время пробоподготовки до десяти раз. Были обнаружены эффекты конформации, отражающиеся в изменении спектра в сравнении с контрольными образцами. Также обнаружено влияние ультразвука на характер кристаллизации белка с помощью метода атомно-силовой микроскопии.

Проведенные эксперименты показали, что созданный ультразвуковой стенд в перспективе позволит осуществлять пробоподготовку растворов белка с сокращением времени высушивания без повреждения пробы и получать спектры комбинационного рассеяния белков с высокой амплитудой.

УДК 538.911

Получение и применение тонких плёнок VO_2 в электродинамических приложениях

***В.И. Полозов*[1,2], *С.С. Маклаков*[1], *С.А. Маклаков*[1], *Л.А. Алексеева*[1], *Д.А. Петров*[1], *А.Д. Мишин*[1], *А.Д. Косов*[3], *С.Н. Старостенко*[1], *В.Н. Кисель*[1]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Тонкие плёнки диоксида ванадия испытывают переход полупроводник-металл при ~67 °C, или при приложении электрического поля напряженностью порядка 10^6 В/м. Возможные приложения этого материала могут быть связаны с воздействием на VO2 температуры, электрического тока или напряжения.

Исследованы тонкие плёнки VO2, полученные в двухстадийном процессе: ВЧ реактивное магнетронное распыление V с осаждением на нагретую поликристаллическую Al2O3 подложку и последующая термическая обработка. Отношение сопротивлений плёнок в полупроводниковом

(при 30 °С равное 10^6 Ом/□) и металлическом состояниях (при 80 °С равное 650 Ом/□) Rs/Rm = 1540. Переход происходит при 53 °С. Температурная зависимость сопротивления плёнки имеет гистерезис с шириной 6 °С.

Было проведено измерение температурной зависимости коэффициента пропускания (S21) полученными образцами СВЧ-излучения частотой 6–20 ГГц в диапазоне от 20 °С до 80 °С. Использован составной образец из 4 пластин VO2 размером 5х6 см. Измерение частотной зависимости коэффициента пропускания образца проводили квазиоптическим методом с использованием печи с радиопрозрачными окнами. Коэффициент S21 при переходе в «металлическое» состояние уменьшается на 0,5–1 дБ по сравнению с «полупроводниковым», в котором он составляет –0.25 дБ. При переходе образец демонстрирует гистерезис, как и в случае контактного электростатического измерения сопротивления. Дополнительные эксперименты с разными нагревательными устройствами показали, что отличия в температуре перехода и ширине гистерезиса, которые могут быть получены при нагреве одного и того же образца разным способом, связаны с теплоёмкостью и инерционностью измерительной системы в целом.

Исследована возможность формирования на основе плёнки структур методом фотолитографии. На поверхность VO2 нанесены контактные площадки из Fe на расстоянии от 10 мкм до 1 см. Контактные площадки имеют хорошую адгезию и ровные края. Получены вольт-амперные характеристики таких «гантелей», а также измерен коэффициент S21 в диапазоне частот от 0 до 100 МГц. ВАХ имеет резкий перегиб при переходе полупроводник-металл при приложении критического напряжения Ucr. Для образца размером 10 мкм Ucr составляет 11 В. Аналогично температурной зависимости сопротивления, ВАХ имеет гистерезис, величина которого зависит от размеров «гантели». Измерения S21, проведенные на вектор-анализаторе, также демонстрируют резкое изменение S21 при переходе.

Реализованный двухстадийный процесс позволяет получать тонкие (толщиной 120 нм) плёнки VO2 с высокой амплитудой перехода металл-диэлектрик. Хорошая адгезия плёнок позволяет формировать на ней структуры микрометровых размеров. Сохраняющаяся после процесса фотолитографии высокая амплитуда перехода, который может быть инициирован как приложением Ucr, так и нагревом, позволяет использовать такие структуры в различных микроэлектронных приложениях вплоть до логических элементов. Измерения, проведенные в СВЧ-области, показывают возможность применения плёнок в качестве управляемых СВЧ-экранов или полосковых линий. Во всей исследованной полосе частот (0 – 20ГГц) спектр коэффициента S21 не имеет особенностей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 18-33-00519 мол_а) и гранта Президента РФ (проект № МК-3115.2018.3).

УДК 530.154

Оптимизация процессов генерации поверхностных плазмон-поляритонов ансамблями полупроводниковых квантовых точек, размещенных вблизи металлической поверхности

***А.В. Шестериков*[1], *М.Ю. Губин*[1], *М.Г. Гладуш*[2], *А.В. Прохоров*[1]**

[1]Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых
[2]Институт спектроскопии РАН

Рассмотрим модель, состоящую из золотой металлической поверхности с нанесенной на нее диэлектрической пленкой (полиэтилентерефталат), содержащей сферические квантовые точки (КТ) на основе полупроводника CdSe (рис. 1а.). Для возбужденной КТ вблизи металлического зеркала скорость развития релаксационных процессов будет в значительной мере определяться размерными эффектами и иметь сильную зависимость от радиуса a КТ и ее расстояния d до металлической поверхности. Задача сводится к оптимизации параметров a и d для достижения максимальных значений скорости преобразования энергии возбужденной КТ в поверхностные плазмон-поляритоны (ППП) на заданной частоте.

В ситуации, когда дипольный момент КТ ориентирован перпендикулярно поверхности зеркала, выражение для относительной скорости релаксации $b_\perp = \tau/\tau_0$ (τ – скорость релаксации в присутствии металлического зеркала, τ_0 – без него) принимает следующий вид [1]:

$$b_\perp = 1 + \frac{3}{2} q \,\mathrm{Im}\left(\int_0^\infty F \mathrm{d}u \right), \qquad (1)$$

где $F \equiv r_p \exp\left(\left(-4\pi\sqrt{\varepsilon_1} l_1 d\right)/\lambda_0\right)\left(u^3/l_1\right)$, q – квантовый выход и введены коэффициенты $r_p = \left(\varepsilon_2 l_1 - \varepsilon_1 l_2\right)/\left(\varepsilon_2 l_1 + \varepsilon_1 l_2\right)$ (амплитудный коэффициент отражения *p*-поляризованного света Френеля от толстого слоя металла) и $l_j = -i\sqrt{\left(\varepsilon_j/\varepsilon_1\right) - u^2}$. Здесь ε_1 – диэлектрическая проницаемость диэлектрика, $\varepsilon_2 = \varepsilon_2' + i\varepsilon_2''$ – комплексная функция диэлектрической проницаемости металла на длине волны λ_0 флуоресцирующей КТ; переменная интегрирования $u = k/k_0$ представляет собой нормированный на $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ волновой вектор.

Для моделирования были выбраны КТ с размерами, при которых частота только одного межзонного перехода $1S(e) \to 1S(h)$ в КТ попадает в область так называемого плазмонного пика [1, 2] и может быть определена следующим образом:

$$\omega_0 = \frac{1}{\hbar}\left(eE_g + \frac{\hbar^2\pi^2}{2a}\left(\frac{\chi_{n'l'}^2}{m_e} + \frac{\chi_{nl}^2}{m_h} \right) - \frac{3.56e^2}{8\pi\varepsilon\varepsilon_0 a} \right), \qquad (2)$$

где m_e(m_h) – эффективные массы электрона (дырки), χ_{nl} – корни сферического уравнения Бесселя первого рода, E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника КТ, e – заряд электрона, ε – диэлектрическая проницаемость материала КТ, a – радиус КТ. Распределение энергии между излучательным и безызлучательным каналами релаксации зависит от вида подынтегральной функции F в (1) с возможностью управления через варьирование параметров a и d (см. рис. 1б). Для решения задачи оптимизации введем параметр интегральной вероятности передачи запасенной КТ энергии в ППП в виде $w_p = \dfrac{b_{sp}}{b_\perp}$ [1], где

$$b_{sp} = \frac{3qA\pi u_{sp}^3}{2Bl_{sp1}} \exp\left(\frac{-4\pi\sqrt{\varepsilon_1} l_{sp1} d}{\lambda_0} \right), \qquad (3)$$

и при условии $\varepsilon_2'' << -\varepsilon_2'$ имеем $A = \left(\left(2l_{sp2}\varepsilon_1 - \left(\varepsilon_2'/l_{sp2}\right)\right) l_{sp1}^3 l_{sp2}^2 \varepsilon_2''\right) \Big/ \left(\left(\varepsilon_1 l_{sp1} + \varepsilon_2' l_{sp2}\right)^2 u_{sp}^2\right)$, $B = \left(\left(l_{sp1}^2 l_{sp2} - \left(l_{sp1}/2\right)\right)\varepsilon_2''\right) \Big/ \left(\left(\varepsilon_1 l_{sp1} + \varepsilon_2' l_{sp2}\right) u_{sp}\right)$, $l_{spi} = \sqrt{u_{sp}^2 - \mathrm{Re}(\varepsilon_i)/\varepsilon_1}$, i=1, 2. На рис. 1б представлена контурная зависимость параметра w_p от радиуса КТ и ее расстояния до металла. Нанесенная на рисунок черная линия соответствует максимальным значениям w_p, найденным оптимизацией по параметру d. Наибольшие значения $w_p \approx 0.997$ достигаются для изготовленных из CdSe КТ с радиусом $a \approx 2$ нм, размещенных на расстоянии $d \approx 69$ нм от золотой поверхности. Рабочая длина волны составит $\lambda_0 = 497$ нм, длина затухания генерируемых ППП равна 21 мкм. При этом снижение скорости генерации ППП при удалении КТ от поверхности может быть частично компенсировано увеличением длины волны λ_0 межзонного перехода при использовании КТ большего радиуса (2).

Однако возможности такой компенсации ограничены наличием горизонтальной асимптоты $\omega_0 = eE_g/\hbar$ в (2), и, начиная с $a \approx 6$ нм, система становится слабо чувствительной к размерным эффектам для КТ. С учетом успехов в области создания и диагностики КТ [3], а также проектирования плазмонных интерфейсов [4] полученные результаты должны быть востребованы

для создания высокоэффективных генераторов ППП. Вместе с тем реализация описываемых моделей на практике требует учета дисперсионных эффектов [5].

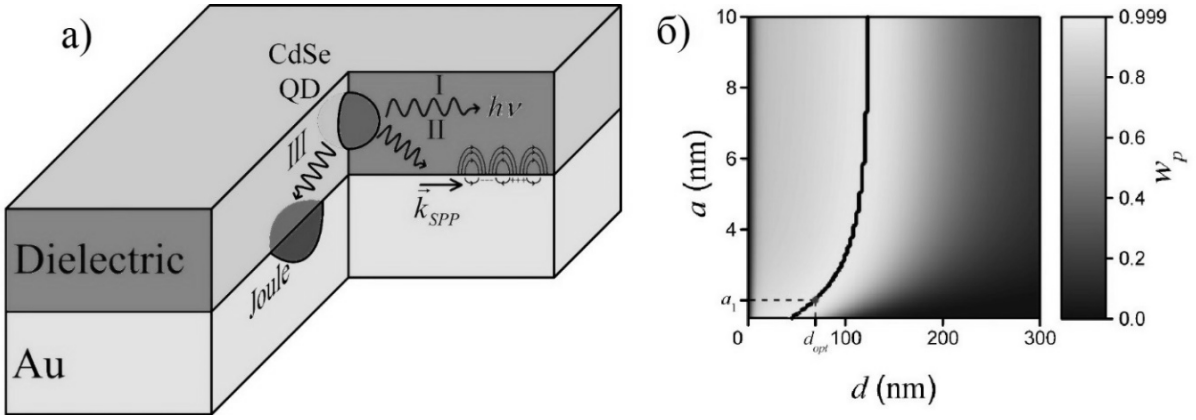


Рис. 1. а) Схематичное изображение КТ вблизи границы раздела металлической и диэлектрической поверхностей с выделенными тремя основными каналами релаксации КТ в I) свет, II) ППП, III) фононы. б) Контурная зависимость параметра эффективности w_p преобразования энергии КТ в ППП от радиуса КТ a и расстояния d КТ до металлического зеркала с нанесённой линией экстремума. Расчёт параметра $b_\perp$ производился численно с использованием метода замены переменных.

Работа поддержана грантом РФФИ 16-02-01174 а и выполнена в рамках государственного задания ВлГУ 3.5531.2017/8.9 (ГБ-1106/17).

Литература

1. *Weber W.H., Eagen C.F.* Energy transfer from an excited dye molecule to the surface plasmons of an adjacent metal // Opt. Lett. 1979. V. 4, N 8. P. 236–238.
2. *Xiao M., Bozhevolnyi S.I., Keller O.* Numerical study of configurational resonances in near-field optical microscopy with a mesoscopic metallic probe // Appl. Phys. A. 1996. V. 62, N 2. P. 115–121.
3. *Magaryan K.A., Mikhailov M.A., Karimullin K.R., et. al.* Spatially-resolved luminescence spectroscopy of CdSe quantum dots synthesized in ionic liquid crystal matrices // J. Lumin. 2016. V. 169. P. 799–803.
4. *Birr T., Zywietz U., Fischer T., Chhantyal P., Evlyukhin A.B., Chichkov B.N., Reinhardt C.* Ultrafast surface plasmon-polariton interference and switching in multiple crossing dielectric waveguides // Appl. Phys. B. 2016. V. 122, N 6. P. 164.
5. *Губин М.Ю., Гладуш М.Г., Прохоров А.В.* Конфигурационный резонанс и скорость генерации поверхностных плазмон-поляритонов возбужденными полупроводниковыми квантовыми точками вблизи металлической поверхности // Оптика и спектроскопия. 2019. № 1. С. 77.

СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ»

Председатель: М.В. Либанов (д.ф.-м.н., профессор РАН)

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

Секретарь: А.И. Шабанов

Дата: 21.11.2018

Время: 10:00-17:00

Место: Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, стр. 7, ауд. 106-107 БФК, МФТИ

УДК 539.1.06

Томография объектов с использованием мюонов космических лучей

А.Н. Фазлиахметов[1,2]

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

Будет представлен небольшой экскурс в историю томографии с помощью мюонов космических лучей, в частности опыты нобелевского лаурета Луиса Альвареса по просвечиванию пирамиды Хефрена в Египте, и дан обзор экспериментов по использованию мюонной томографии в сфере радиационной безопасности, неразрушающего контроля, геологии и т. д.

УДК 539.172.13

Исследование влияния 3*N*-сил на величину извлекаемой энергии синглетного *pp*-состояния в реакции $d+{}^1\mathrm{H}\to p+p+n$

Е.С. Конобеевский[2]***, С.В. Зуев***[2]***, М.В. Мордовской***[1,2]***, А.А. Афонин***[2]***, А.А. Каспаров***[2]***, В.В. Мицук***[1,2]

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

Исследование и сравнение *nn*- и *pp*-взаимодействий являются важными в связи с проверкой гипотезы о зарядовой симметрии ядерных сил. Нарушение зарядовой симметрии (НЗС) ядерных сил, т. е. различие ядерных *nn*- и *pp*-взаимодействий, проявляется, в частности, в различии низкоэнергетических характеристик *nn*- *и pp*-взаимодействия – синглетных длин рассеяния и энергий виртуального ${}^1S_0$ уровня. Протон-протонная длина рассеяния находится из экспериментов по свободному *pp*-рассеянию (a_{pp} = −17,3 ± 0,4 Фм); ее погрешность связана главным образом с модельно-зависимой процедурой исключения электромагнитной компоненты *pp*-взаимодействия. Нейтрон-нейтронная длина рассеяния определяется в основном в реакциях $n + d \to p + n + n$ и $\pi^- + d \to \gamma + n + n$ при исследовании взаимодействия в конечном состоянии (ВКС) двух нейтронов, имеющих малую относительную энергию. В [1] было высказано предположение, что разброс значений a_{nn} (от –16 до –22 Фм), полученный в реакциях с тремя частицами в конечном состоянии, может быть связан с большим влиянием 3*N*-сил.

Можно предположить, что и значения протон-протонной длины рассеяния a_{pp}, и энергии виртуального $^1S_0$ уровня E_{pp}, извлеченные из экспериментов с тремя или четырьмя частицами в конечном состоянии, будут отличаться от значений, полученных в свободном *pp*-рассеянии. Для проверки этого предположения в ИЯИ РАН запланированы работы по исследованию реакций $d + {}^1\mathrm{H} \rightarrow p + p + n$, $d + {}^2\mathrm{H} \rightarrow p + p + n + n$ и $p + {}^2\mathrm{H} \rightarrow p + p + n$. Во всех этих реакциях в промежуточном состоянии возможно взаимодействие *pp*-пары с нейтроном (или *nn*-парой), что может отразиться на величинах извлекаемых низкоэнергетических параметров (a_{pp} и E_{pp}). В настоящей работе приводятся результаты подготовки эксперимента по извлечению величины E_{pp} в реакции $d + {}^1\mathrm{H} \rightarrow p + p + n$.

На первом этапе проведено кинематическое моделирование данной реакции с использованием комплекса программ, разработанного в ИЯИ РАН [2, 3]. В ходе моделирования реакции были подобраны параметры экспериментальной установки (углы установки детекторов нейтронов и протонов, а также их расстояния от мишени, находящейся в вакуумной камере). Затем было проведено моделирование прохождения протонов через систему Δ*E*- и *E*-детекторов. В результате моделирования были получены спектры и Δ*E*-*E*-диаграммы детектируемых протонов для последующего сравнения с экспериментальными данными.

Выполнена подготовительная работа для проведения эксперимента, в том числе отобраны и прокалиброваны кремниевые детекторы для регистрации протонов с соответствующей условиям моделирования толщиной и детектор для регистрации нейтронов на основе жидкого сцинтиллятора. Проведены тестовые измерения системы сбора и обработки информации на основе цифровых сигнальных процессоров DPP 5720 и DPP 5742, получены амплитудные и временные спектры с детекторов.

Литература

1. *Конобеевский Е.С., Зуев С.В., Каспаров А.А., Кукулин В.И., Лебедев В.М., Мордовской М.В., Померанцев В.Н., Спасский А.В.* Низкоэнергетические параметры нейтрон-нейтронного взаимодействия: анализ данных, извлеченных из реакций *nd*- и *dd*-развалов // Ядерная физика 2018. Т. 81. № 5. С. 555–563.
2. *Зуев С.В., Каспаров А.А., Конобеевский Е.С.* Программа для моделирования экспериментов по изучению реакций с тремя частицами в конечном состоянии // Известия РАН. Серия физическая. 2014. Т. 78. № 5. С. 527–531.
3. *Зуев С.В., Каспаров А.А., Конобеевский Е.С.* Математическое моделирование малонуклонных экспериментов с тремя и более частицами в конечном состоянии // Известия РАН. Серия физическая. 2017. Т. 81. № 6. С. 753–757.

УДК 539.1.074.6

Измерение основных характеристик лавинных фотодиодов для исследования распадов каонов в эксперименте NA62

***А.Е. Смирнов*[1,2]**

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

Основной целью эксперимента NA62 [1] в ЦЕРН является изучение ультраредкого распада каонов $\mathrm{K}^+ \rightarrow \pi^+ \nu\bar{\nu}$. Особенностью этого распада является то, что он сильно подавлен и точно рассчитывается в стандартной модели, и поэтому его наблюдение может послужить проверкой СМ, а также позволит обнаружить новые физические процессы за рамками этой модели.

В настоящее время в этом эксперименте рассматривается создание дополнительной вето системы, состоящей из сцинтилляционных счетчиков с кремниевыми фотоумножителями (SiPM) и обладающей высоким временным разрешением. SiPM представляет собой твердотельный фотодетектор [2], который, поглощая фотоны, может генерировать импульс тока длиной несколько десятков наносекунд, содержащий от 10^5 до 10^6 электронов. Следовательно, SiPM имеет коэффициент усиления. Это усиление сравнимо с коэффициентом усиления обычного фотоумножителя. Существует несколько ключевых параметров, характеризующих кремниевый фотоумножитель. Среди них усиление, эффективность регистрации фотонов, перекрестный шум

(optical cross-talk). Эти параметры были измерены в данной работе при различных температуре и напряжении.

SiPM является уникальным прибором, способным регистрировать одиночные фотоны благодаря следующим свойствам:

1) высокое усиление сигнала позволяет существенно уменьшить требования к электронике;
2) стабильность коэффициента усиления (разброс в пределах 10%) дает низкий уровень шумов;
3) маленькая чувствительность к изменениям температуры и подаваемого напряжения.

SiPM – устройство, состоящее из множества пикселей. Пиксель иногда называют микроячейкой. Каждый пиксель представляет собой последовательную комбинацию лавинного фотодиода и токоограничивающего резистора. Все микроячейки соединены параллельно. Таким образом, SiPM имеет два контакта: анод и катод. Кремниевый фотоумножитель работает так, что напряжение смещения на каждом лавинном фотодиоде превышает напряжение пробоя. Следовательно, каждый лавинный фотодиод работает в гейгеровском режиме. Режим Гейгера – очень неустойчивое состояние, которое может быть нарушено даже одним фотоном, что приводит к образованию лавины. Разность между напряжением смещения и напряжением пробоя есть перенапряжение (overvoltage). Она является основным регулируемым параметром, контролирующим работу устройства. Если SiPM поглотит фотон, то получившийся носитель заряда (электрон или дырка в зависимости от структуры устройства) может вызвать лавину в области усиления. Лавина может произвести 10^5–10^6 носителей. Это и определяет наше усиление. Токоограничивающий резистор позволяет гасить гейгеровский разряд. Кроме того, кремниевый фотоумножитель является аналоговым устройством, создающим переменный во времени выходной сигнал, который может быть измерен в режиме реального времени.

SiPM создает три компоненты шума: перекрестные помехи (optical cross-talk), темновой ток и послеимпульсы (afterpulses). Термически генерируемые носители заряда, вызывающие лавину, отвечают за темновой ток. Темновой ток является случайным процессом и всегда присутствует, независимо от уровня освещенности фотодетектора. Его скорость (количество импульсов в единицу времени) увеличивается с температурой и перенапряжением. Наличие двух других шумов связано с появлением лавины, которая может быть вызвана либо фотогенерируемым, либо термически генерируемым (темным) носителем заряда. Во время первичной лавины какой-либо заряд может быть захвачен в пикселе. Но он может быть освобожден уже после того, как пиксель восстановился после первичной лавины, тем самым вызывая вторичную лавину. Этот процесс называется afterpulses. Optical cross-talk возникает, когда лавина в пикселе испускает фотоны, которые вызывают одну или несколько лавин в соседних пикселях. Результирующий выходной сигнал представляет собой суперпозицию сигналов от сработавших пикселей.

Эффективность регистрации фотонов – это вероятность того, что кремниевый фотоумножитель (SiPM) создаст выходной сигнал в ответ на падающий фотон. Это функция зависит от перенапряжения ΔV и длины волны λ падающего света.

В данной работе были получены зависимости основных параметров кремниевых фотодиодов от температуры и напряжения, которые полностью согласуются с полученными ранее результатами и будут использоваться в дальнейшем для создания дополнительной вето системы.

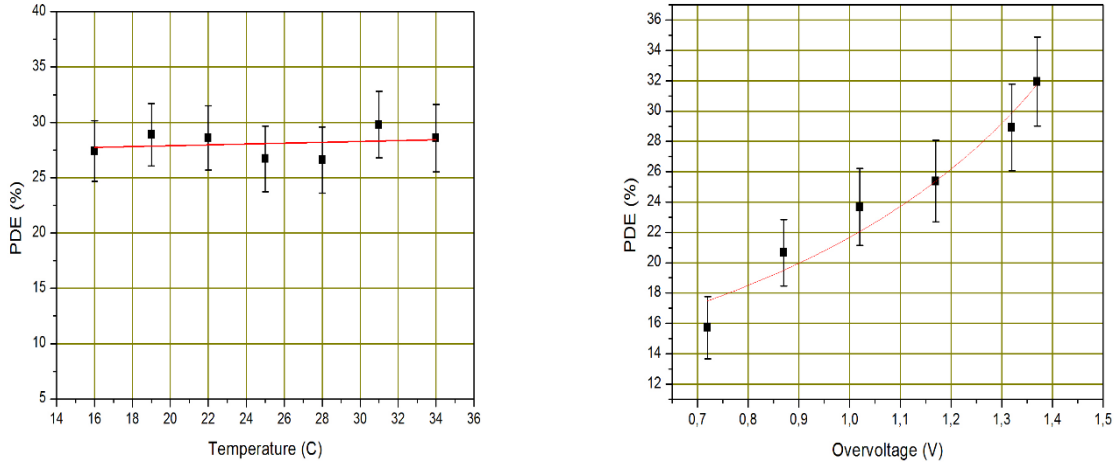


Рис. 1. Зависимость эффективности регистрации фотонов от температуры и перенапряжения

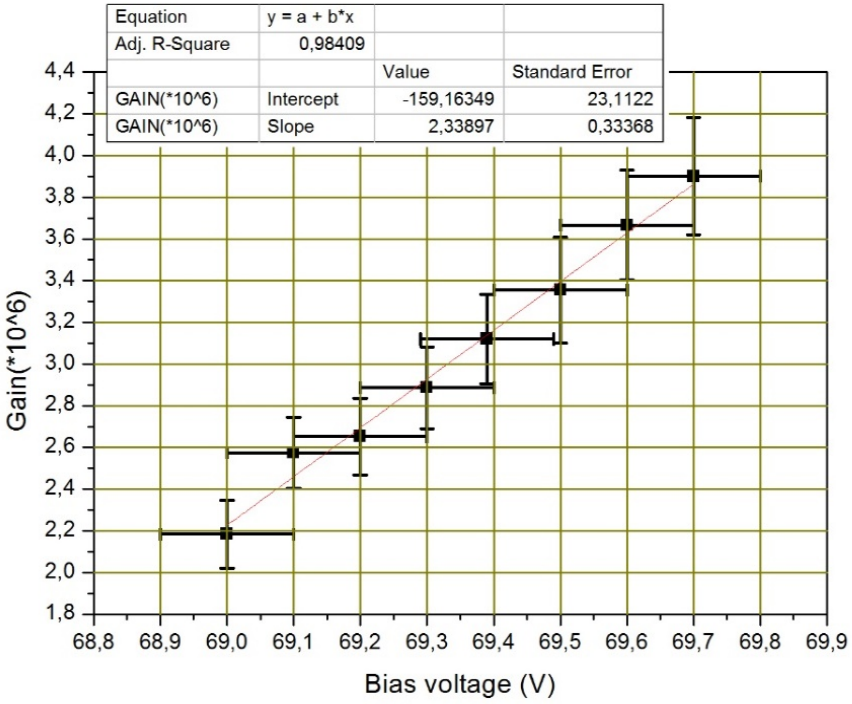


Рис. 2. Зависимость усиления от приложенного напряжения

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00245

Литература

1. *Cortina E* [*et al.*]. The Beam and detector of the NA62 experiment at CERN // JINST.2017.V.12.P05025.
2. *Renker D. and Lorenz E.* Advances in solid state photon detectors // JINST.2009.V.4.P04004.

УДК 539.12.01

Вклад операторов размерности 7 в взаимодействие топ-кварка с нейтральным током с нарушением аромата

В.В. Денисов[1,2], С***.Р. Слабоспицкий***[2]

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

Поиск отклонений от предсказаний стандартной модели (СМ) и поиск новой физики является одной из главных задач физики частиц. Одним из направлений поиска таких отклонений является детектирование редких процессов, например, взаимодействия с нейтральным током с нарушением аромата. Топ-кварк – один из перспективных объектов для изучения таких процессов из-за своих уникальных физических характеристик: большая масса, малое время жизни, элемент матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскавы [1]. Взаимодействия топ-кварка с нейтральным током с нарушением аромата сильно подавлены из-за механизма Глешоу–Илиопулоса–Майани (GIM-механизм) [1], поэтому наблюдение таких процессов явно будет указывать на существование новой физики за рамками СМ.

Для описания процессов с нейтральным током с нарушением аромата используется формализм эффективной теории поля, в котором такие взаимодействия описываются эффективным лагранжианом [2]. Эффективный лагранжиан должен сохранять калибровочную группу симметрий СМ и содержать операторы высших размерностей, подавленные размерным параметром новой физики.

Операторы размерностей 5 и 6 были построены и детально проанализированы [3, 4].

В работе построен лагранжиан с оператором размерности 7 взаимодействия топ-кварка с нейтральным током с нарушением аромата [5]. Были получены правила Фейнмана для такого типа взаимодействий, рассчитаны ширины распада топ-кварка в таких взаимодействиях.

Литература

1. *Beneke M.* [*et al.*]. Top quark physics // Standart model physics (and more) at the LHC. arXiv:hep-ph/0003033. Altarelli G. and Mangano M. L. eds., Geneva, Switzerland: CERN (2000) 529 p.
2. *Buchmuller W. and Wyler D.* Effective Lagrangian Analysis of New Interactions and Flavor Conservation // Nucl. Phys. B. 1986. 268. 621.
3. *Aguilar-Saavedra J.A.* A Minimal set of top anomalous couplings // Nucl. Phys. B. 2009. 812. 181.
4. *Grzadkowski B. , Iskrzynski M., Misiak M. and Rosiek J.* Dimension-Six Terms in the Standard Model Lagrangian // JHEP. 2010. 1010. 085.
5. *Denisov V.V., Slabospitkii S.R.* Dimension-seven operator contribution to the top quark anomalous interactions. [arXiv:1803.00313v1 [hep-ph]].

УДК 539.1.074.3

Калибровка модулей адронного калориметра установки MPD/NICA

А.О. Тимошенко

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

Одной из актуальных задач современной физики является изучение свойств горячей и плотной ядерной материи. Согласно предсказаниям квантовой хромодинамики (КХД) в таких условиях возможно существование нового состояния материи – кварк-глюонной плазмы (КГП). В настоящее время в области энергий 2–10 ГэВ/нуклон, наиболее интересной с точки зрения изучения фазового перехода между различными состояниями ядерной материи, ощущается нехватка статистики. С целью получения новых данных в этой области в ОИЯИ на базе Нуклотрона сооружается ускорительно-накопительный комплекс ионов NICA. Многоцелевой детектор (MPD), установленный в месте столкновения пучков, предназначен для исследования свойств фазовых

переходов и смешанной кварк-глюонной фазы, для поиска эффектов, связанных с деконфайнментом и восстановлением киральной симметрии.

Одной из основных частей экспериментальной установки MPD является передний адронный калориметр (FHCal), предназначенный для измерения геометрии ионных столкновений – центральности и плоскости реакции. FHCal состоит из двух идентичных частей, расположенных слева и справа от точки столкновения пучков. Калориметр состоит из 88 индивидуальных модулей с поперечными размерами 15 × 15 см каждый. Конструкция модуля включает в себя 42 чередующиеся пластины поглотителя адронного ливня (свинца) и сцинтиллятора в отношении 4:1 (толщиной 16 и 4 мм соответственно). Каждые шесть пар свинцовых/сцинтилляционных пластин объединены в одну продольную секцию. Свет с шести сцинтилляционных пластин собирается с помощью переизлучающего оптоволокна и попадает на микропиксельный лавинный фотодиод Hamamatsu MPPC S12572-010C/P, установленный в торце модуля. Таким образом, в каждом модуле амплитудные сигналы считываются семью фотодиодами, что обеспечивает продольную сегментацию.

С целью определения светового выхода в каждой из секций калориметра проведена абсолютная калибровка лавинных фотодиодов и считывающей электроники, включающей аналоговую и цифровую части. Абсолютная калибровка основывается на определении параметров амплитудных спектров, набранных от световых сигналов светодиода разной амплитуды. Полученные спектры обрабатываются в предположении, что амплитудные распределения подчиняются распределению Пуассона. В этом приближении количество фотоэлектронов в амплитуде спектра равно квадрату среднеквадратичного отклонения. На рис. 1 можно видеть пример спектра и полученное число фотоэлектронов.

Энергетическая калибровка, а также определение световыхода в продольных секциях модулей осуществляется с помощью космических мюонов. С этой целью проведены измерения с различной геометрией треков мюонов в модуле адронного калориметра. Для измерений отбирались события с одновременным срабатыванием двух, трех или всех семи секций модуля. На рис. 2 показан типичный спектр амплитуд, выделенных мюонами в одной секции калориметра.

На рис. 3 показан выраженный в фотоэлектронах световыход секций модуля в зависимости от того, проходит ли мюон три соседние или все секции модуля. Как видно, результаты измерений в обоих случаях хорошо согласуются друг с другом. Отметим, что калибровка модулей горизонтальными мюонами, проходящими через все семь секций, является наиболее простой. Однако ввиду недостаточной статистики таких событий используется отбор мюонов, проходящих через две или три соседние секции.

Зная потери энергии мюона в веществе сцинтиллятора каждой секции (~5 МэВ), можно определить коэффициенты калибровки, а следовательно, и суммарное энерговыделение в модуле. Дальнейший анализ данных с детектора позволяет определять геометрию столкновения, что и является его основной задачей в эксперименте.

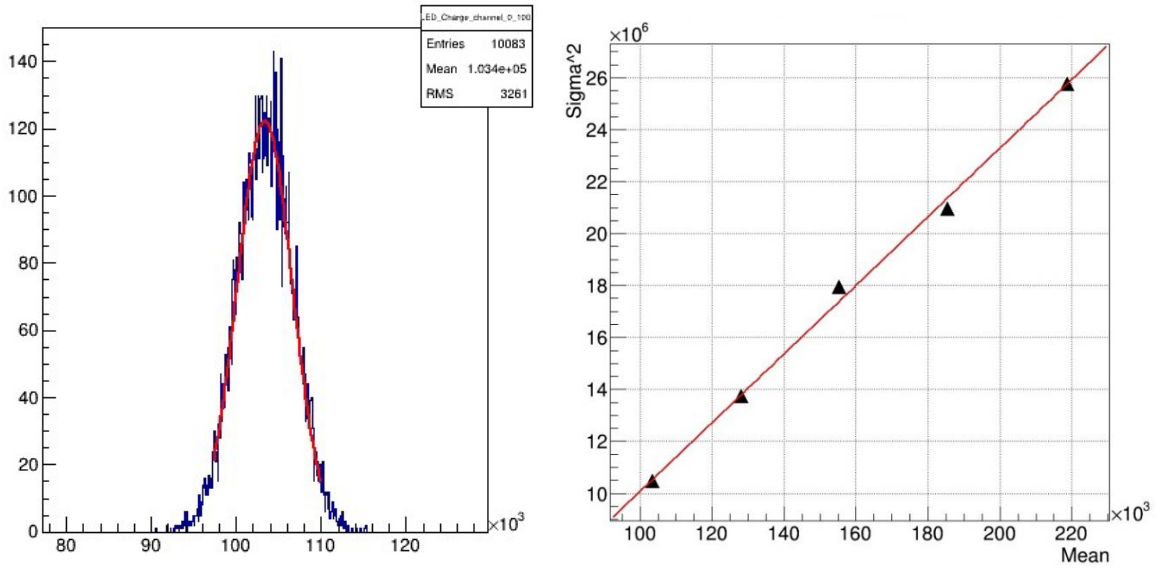


Рис. 1. Типичный спектр для одной амплитуды вспышки и полученный график числа фотоэлектронов для ADC64

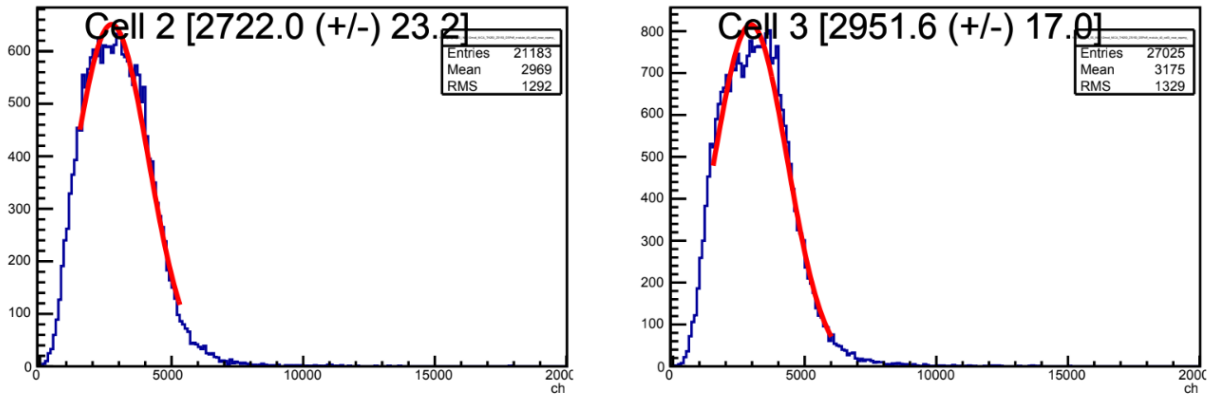


Рис. 2. Спектры амплитуд, выделенные мюонами, в двух секциях калориметра. По горизонтали отложены каналы платы ADC64

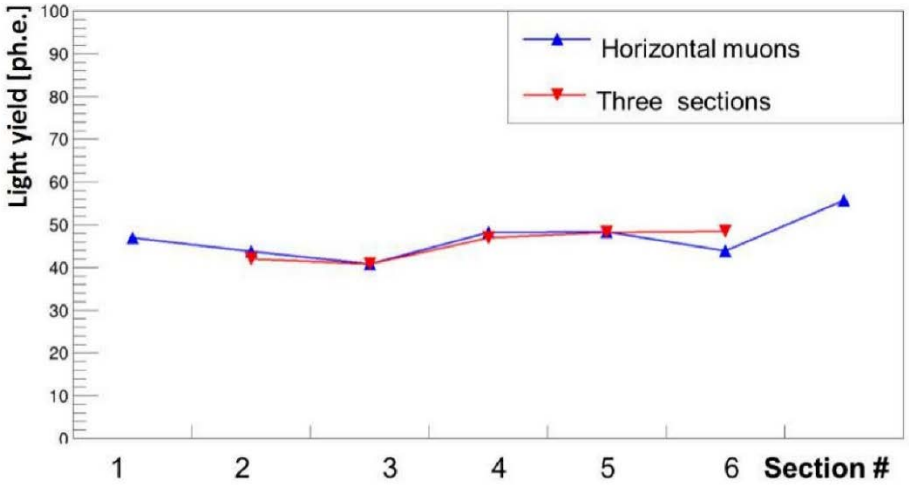


Рис. 3. Световыход в разных секциях модуля для двух методов отбора

УДК 519.25.256

Проект детектора ANTI-0 для эксперимента NA62 (CERN)

А. Костин, С. Федотов

Институт ядерных исследований РАН

В работе представлен проект нового детектора ANTI-0 для эксперимента NA62. Рассмотрены основные, возлагаемые на него, требования и задачи. Представлен предполагаемый вариант структуры нового детектора и определена предполагаемая загрузка его элементов при номинальной интенсивности пучка.

Эксперимент NA62 [1] базируется на пучке ускорителя SPS в CERN. Основной целью этого эксперимента является изучение сверхредкого каонного распада $K^+ \to \pi^+ \nu\tilde{\nu}$. Этот распад сильно подавлен и точно рассчитывается в стандартной модели, поэтому экспериментальное измерение вероятности распада может позволить как проверить саму стандартную модель, так и получить данные о новой физике. В настоящее время в эксперименте E949 (БНЛ, США) зарегистрировано семь таких распадов [2, 3], что недостаточно для проверки предсказаний стандартной модели. В эксперименте NA62 планируется достигнуть 10% точности измерений. Схема эксперимента представлена на рис. 1.

Для достижения главной цели эксперимента прямая регистрация пучкового гало не требуется, поэтому, несмотря на большое количество вето-детекторов и многоуровневую триггерную систему, не существует детектора, который бы осуществлял регистрацию пучкового гало. Однако из анализа данных 2016 года следует, что основным источником фона при поиске основного распада оказались взаимодействия гало пучка в последней станции GTK. Помимо этого, знание о гало пучка может быть крайне полезным при исследовании различных экзотических распадов, также изучаемых в эксперименте NA62; а также при работе эксперимента в режиме «Dump mod» возможно значительное уменьшение предполагаемого фона. Поэтому было принято решение о создании нового вето-детектора ANTI-0, предназначенного для регистрации мюонного гало пучка. Он должен быть полностью собран и установлен в экспериментальном холле NA62 за время большой остановки в CERN.

Основными требуемыми параметрами детектора ANTI-0 являются высокая эффективность регистрации заряженных частиц и хорошее временное разрешение (< 1 нс). А размеры детектора должны полностью перекрывать вход в распадный объем. В результате обсуждений было принято решение о создании однослойного сегментированного сцинтилляционного детектора. Детектирующие элементы этого детектора предполагается закрепить на тонком каркасе с разных сторон и в шахматном порядке, что позволит избежать мертвых зон регистрации частиц. Схема детектора ANTI-0 представлена на рис. 2.

Детектирующие элементы детектора предполагается изготовить из сцинтилляционных плиток размерами 120 × 120 мм. Сигнал с каждого из этих сегментов должен считываться с двух противоположных сторон с помощью двух световодов и соответствующих им двух SiPM. При такой конфигурации общее число элементов детектора составляет 280 и, соответственно, число считывающих каналов равно 560. Детектор полностью покроет трубу распадного объема, а максимальная загрузка отдельных элементов детектора мюонами гало составит менее 1 МГц. Предполагается, что детектор должен быть полностью собран, установлен и подключен к триггерной системе эксперимента NA62 за два года, в период большой остановки в CERN.

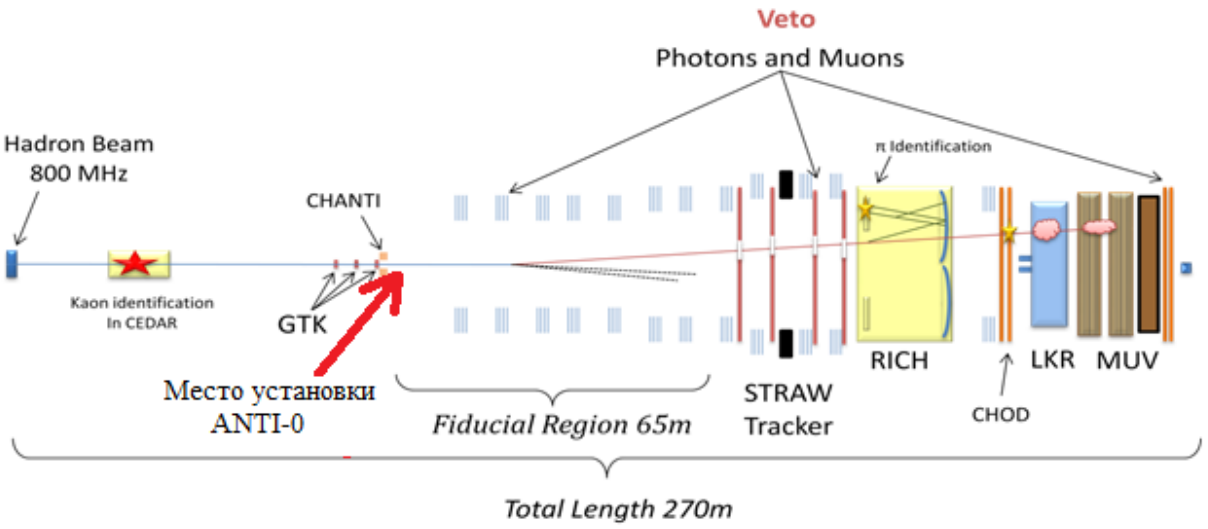


Рис. 1. Схема эксперимента NA62

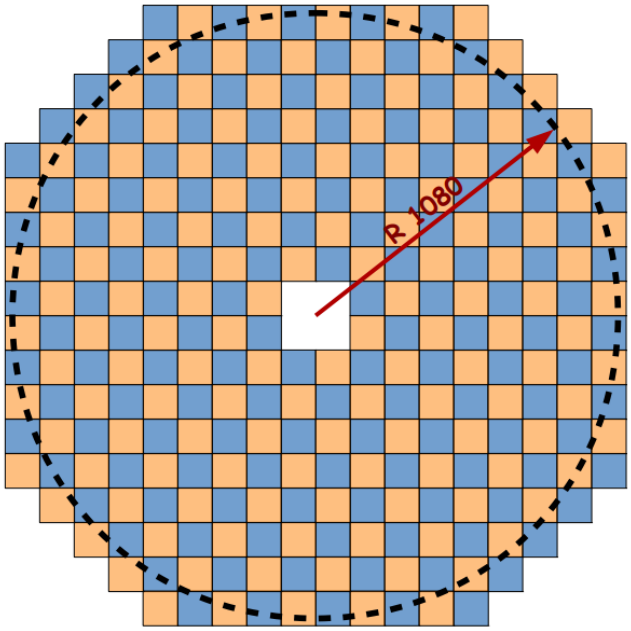


Рис. 2. Схема детектора ANTI-0. Голубые и оранжевые элементы располагаются с разных сторон каркаса детектора

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-32-00245.

Литература

1. *Cortina Gil E., Fedotov S.* [*et al.*]. NA62 Collaboration. The beam and detectors of the NA62 experiment at CERN // Journal of Instrumentation. 2017. V. 12. N 05. P. P05025.
2. *Artamonov A.V.* [*et al.*]. E949 Collaboration. // Phys. Rev. Lett. 2008. 101. 191802.
3. *Artamonov A.V.* [*et al.*]. E949 Collaboration. // Phys. Rev. D79. 2009. 092004.

УДК 539.1.074.4

Исследование вето системы нейтринного детектора NuPRISM

В.В. Волков[1,2]

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

Ускорительные эксперименты с длинной базой, в частности такие, как T2K, NOνA, набрали значительную статистику нейтринных событий в дальнем детекторе, которая позволила значительно улучшить точность измерений осцилляционных параметров и получить первые указания на CP нарушение в нейтринных осцилляциях. Дальнейший прогресс в этом направлении связан как с продолжением набора статистики, так и с необходимым уменьшением систематических погрешностей. В следующем поколении экспериментов (T2HK, DUNE) требуется, чтобы общая систематическая неопределенность в определении числа зарегистрированных событий в дальнем детекторе составляла около 3%. Одним из способов повышения чувствительности экспериментов с длинной базой, в частности T2K [1], является создание и установка промежуточного водного черенковского детектора на расстоянии 1–2 км от пионорождающей мишени.

В качестве такого промежуточного детектора предлагается черенковский детектор NuPRISM (Neutrino Precision Reaction Independent Spectrum Measurement) [2], который будет располагаться между ближним ND280 и дальним Супер-Камиоканде детекторами. Предполагаемое место размещения нового детектора — примерно 1 км от мишени, размер будущего детектора должен быть порядка 50 м, при диаметре внутреннего детектора 6 м, а внешнего 10 м, как показано на рис. 1.

Данная работа посвящена исследованию вето системы, которую планируется разместить вокруг черенковского детектора. Основными функциями вето системы являются идентификация и подавление фона от взаимодействия нейтрино в окружающем грунте и организация триггера космических мюонов для калибровки детектора. Идея создания вето системы базируется на технологии SMRD детекторов [3], разработанных и созданных в ИЯИ РАН для ближнего нейтринного детектора ND280 эксперимента T2K. Также проведено исследование возможной вето системы между внешним и внутренним детекторами для подавления фона гамма-излучения. При этом предполагалось, что нет никакого вещества между внешним и внутренним детекторами, а также исключены все взаимодействия, в результате которых появлялись частицы с потерей кинетической энергии из-за эффекта Черенкова большей, чем 50 МэВ во внешнем детекторе. В результате удалось уменьшить гамма-излучение примерно в три раза, в то время как эффективность сигнала была потеряна только на 14%. Были промоделированы взаимодействия нейтрино в окружающей среде и 1 м толщины внешнего детектора. Этапы симулирования заключались в следующем: сначала частица входит во внешний детектор с некоторой кинетической энергией, если частица не выходит из внешнего детектора или же ее энергия ниже черенковского порога, то берется разность между ее входной энергией и пороговой. Затем, если энергия частицы выше порога на выходе, берется разность ее кинетической энергии на входе и выходе. Затем считается разность энергии для всех заряженных частиц в текущем событии и складываются энергии. Если суммарная энергия больше, чем 50 МэВ, то принимается, что событие может быть «ветировано», основываясь на черенковском излучении во внешнем детекторе. Вето внешнего детектора накладывается на любое событие, которое теряет по меньшей мере 50 МэВ энергии во внешнем детекторе, как определено черенковскими порогами для разных частиц.

В результате проделанной работы становится очевидной эффективность применения вето системы между внешним и внутренним детекторами для уменьшения фона гамма-излучения. Значение фактора уменьшения фона меняется от 11,6 для порога в 50 МэВ до 7,3 для порога 150 МэВ при потере сигнала в 11% и 16% соответственно. Эффективность вето системы в зависимости от энергии показана на рис. 2.

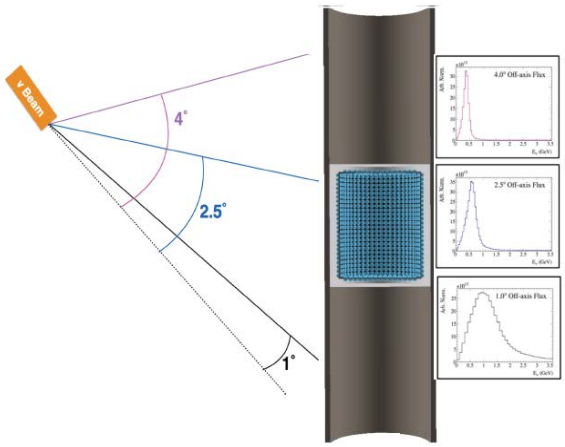


Рис. 1. Общий вид детектора NuPRISM

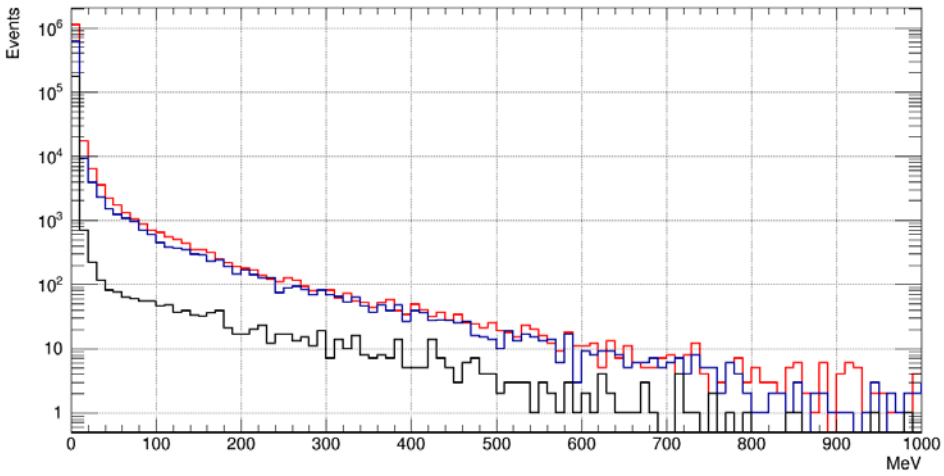


Рис. 2. Отношения сигналов, зарегистрированных в детекторе, до и после применения вето системы. Красным — общее число гамма–квантов, входящих во внешний детектор. Синим — число событий, зарегистрированных во внутреннем детекторе. Черным — число событий во внутреннем детекторе из тех, что были зарегистрированы во внешнем

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-00070\18.

Литература

1. *Abe K.* [*et al.*]. Neutrino oscillation physics potential of the T2K experiment // Progress of Theoretical and Experimental Physics. 2015.
2. *Bhadra S.* [*et al.*]. Letter of Intent to Construct a nuPRISM Detector in the J-PARC Neutrino Beamline. 2014. arXiv:1412.3086 [physics.ins-det].
3. *Aoki S.*[*et al.*]. The T2K Side Muon Range Detector (SMRD) // Nucl. Instrum. Meth. A698. 2013. 135–146.

УДК 539.173

Сечение захвата солнечных нейтрино ядром ^{76}Ge

***А.К. Выборов*[1,2], *Л.В. Инжечик*[1], *Г.А. Коротеев*[1], *Ю.С. Лютостанский*[3], *В.Н. Тихонов*[3], *А.Н. Фазлиахметов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»

В современных и планируемых экспериментах по поиску двойного безнейтринного бета-

распада ($0\nu\beta\beta$-распада) возникает задача определения количества фоновых событий, индуцированных солнечными нейтрино. Эксперименты типа GERDA (LEGEND) используют детекторы из сверхчистого кристаллического ^{76}Ge в качестве мишени для изучения $2\nu\beta\beta$-распада ^{76}Ge в ^{76}Se. Безнейтринный двойной бета-распад ($0\nu\beta\beta$) ядра ^{76}Ge будет зафиксирован, если суммарная энергия вылетающих бета-электронов окажется равной 2039 кэВ [1]. Захват солнечных нейтрино ядром ^{76}Ge имитирует этот сигнал, создавая тем самым практически неустранимый экспериментальный фон. На первой стадии эксперимента GERDA [2] нейтрино-индуцированные фоновые события вносили несущественный вклад в общий уровень фона. Для экспериментов следующего поколения (LEGEND) [3] этот вопрос требует отдельного исследования, что вызывает дополнительный интерес к теме нейтрино-ядерных реакций.

Влияние нейтринных фоновых событий демонстрируется на рис. 1, где схематически показаны возбужденные состояния ядра-изобары ^{76}As, различные участки спектра возбуждений и изотопы, образующиеся в результате нейтринных захватов и последующих распадов. Как видно из рис. 1 конечное при двойном бета-распаде изотопа ^{76}Ge ядро ^{76}Se образуется и при нейтринном захвате на начальном ядре ^{76}Ge с последующим распадом образовавшегося ядра-изобары ^{76}As в конечное ядро ^{76}Se [4]. Этот процесс, индуцированный солнечными нейтрино, дает заметное количество фоновых событий, поэтому он детально изучается в настоящей работе.

В работе были учтены как дискретные, так и непрерывные уровни энергии промежуточного ядра ^{76}As. В расчетах использовались экспериментальные данные по силовой функции S(E), полученные в зарядово-обменной реакции ^{76}Ge(^{3}He,t)^{76}As. Исследовалось влияние резонансной структуры силовой функции S(E) на рассчитываемое сечение σ(E). Показано, что только гигантский гамов-теллеровский резонанс дает вклад порядка 10% и еще бóльший вклад дают возбуждения, расположенные ниже в непрерывной части спектра.

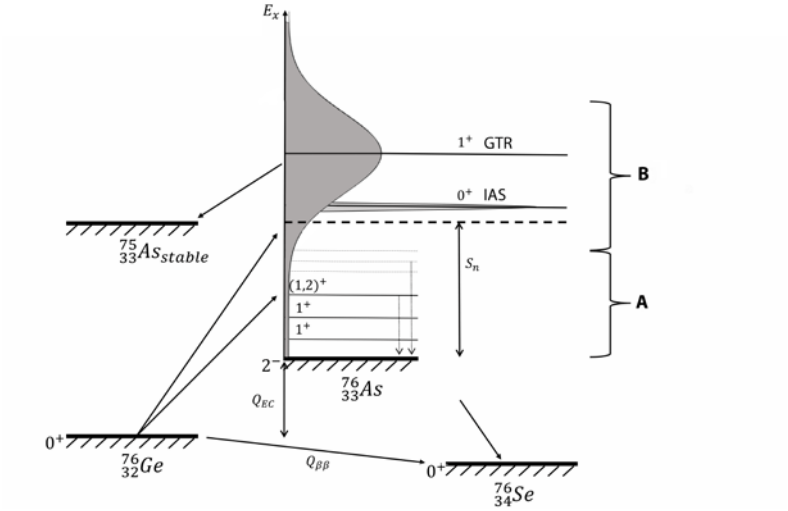


Рис. 1. Схема $2\nu\beta\beta$-распада ^{76}Ge через промежуточное ядро ^{76}As. Литерой А обозначена область энергий, соответствующая непрерывным возбужденным состояния; В – область дискретных возбужденных уровней. Штриховая линия обозначает энергию отрыва нейтрона

Литература

1. *Ackermann K.* [*et al.*] // Eur. Phys. J. C. 2013. 73: 2330.
2. *Agostini M.* [*et al.*] // Eur. Phys. J. C. 2014. 74: 2764.
3. *Abgrall N.* [*et al.*] // AIP Conference Proceedings. 2017. 1894. 020027.
4. *Inzhechik L.V., Gaponov Yu.V., Semenov S.V.* // Yad.Fiz. 1998. 61. 1384–1388.

УДК 53.082

Проектирование детектора протонов и электронов для мониторинга солнечных космических лучей

Е.М. Стадничук

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

В результате спорадических явлений солнечной активности электроны и ионы ускоряются до энергий до нескольких МэВ и до нескольких ГэВ соответственно. Таким образом образуются солнечные космические лучи (СКЛ) [1]. Во время солнечных вспышек их интенсивность становится высокой, что опасно для космонавтов и космической аппаратуры [4]. Для мониторинга потока электронов и ионов СКЛ, а также для измерения их спектра в настоящей работе разрабатывается детектор.

Детектор представляет собой цилиндр, состоящий из нескольких сцинтилляционных шайб. При прохождении частиц сквозь детектор в шайбах высвечиваются фотоны, которые через оптоволокно попадают в SiPM.

Детектор проектируется для измерения электронов с кинетической энергией от 1 до 10 МэВ и протонов с кинетической энергией от 10 МэВ до 100 МэВ. Методика измерения основана на кривой ионизационных потерь частиц в веществе. Частицы, проходя сквозь детектор, в разных шайбах выделяют разное количество энергии, что позволяет восстановить кривую потерь. Для протонов эта кривая имеет характерный пик Брегга [3], по положению которого можно определить энергию частицы.

Расчёт выделения энергии в шайбах был выполнен с помощью Монте-Карло моделирования на Geant4 [2]. В качестве физической модели использовался модуль стандартной электромагнитной физики G4EmStandartPhysics, включающий в себя описание процессов, оказывающих основное влияние на распространение частиц в детекторе: ионизационные потери, упругое кулоновское рассеяние и тормозное излучение.

В силу того, что детектор разрабатывается для измерений в космосе, то требовалось оптимизировать его габариты и массу. Длина детектора будет составлять 7 см, диаметр шайб составит 3 см. Такие габариты позволяют останавливать частицы в требуемом диапазоне энергий, а также поглощать большую часть электромагнитных ливней, рождённых регистрируемыми частицами в детекторе. Суммарная масса детектора включая электронику и корпус не превысит 700 г.

Детектор будет работать в двух режимах: в счётном и в интегральном. Счётный режим используется в том случае, когда поток частиц СКЛ ниже скорости регистрации детектора. В таком случае каждая кривая потерь анализируется отдельно, и по ней определяется энергия частицы методом максимального правдоподобия. Интегральный режим используется при большом потоке СКЛ, например, во время солнечных вспышек. В этом режиме выделяемые энергии регистрируемых частиц складываются, и анализируется суммарная кривая потерь. Из неё, например, с помощью регуляризации Турчина [5] восстанавливается спектр частиц. Погрешность детектора не превысит 10%.

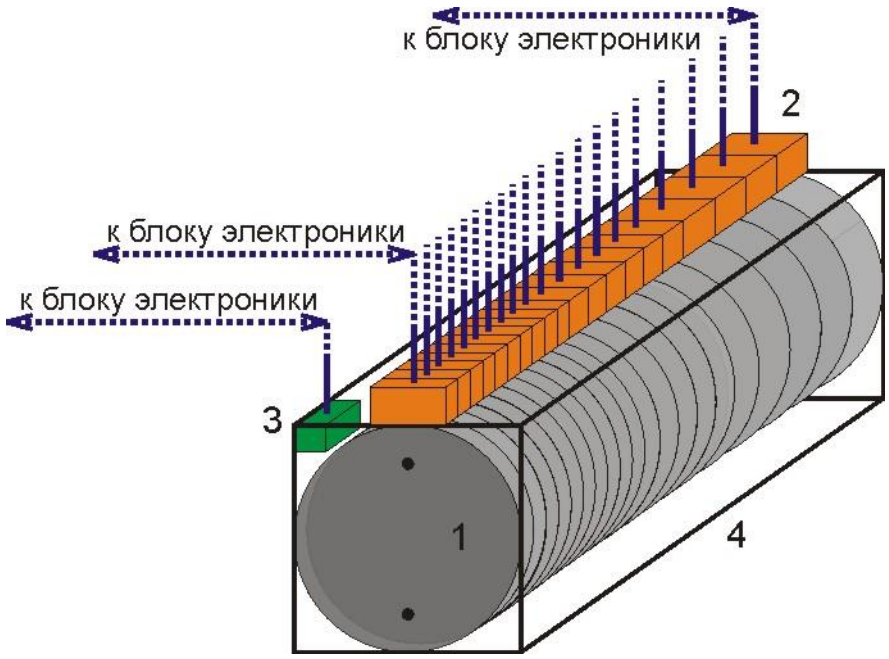


Рис. 1. Основные элементы детекторного блока макета: 1 – сцинтилляционные шайбы, 2 – кремниевые лавинные фотодиоды (SiPM), 3 – температурный датчик, 4 – монтажно-защитный корпус

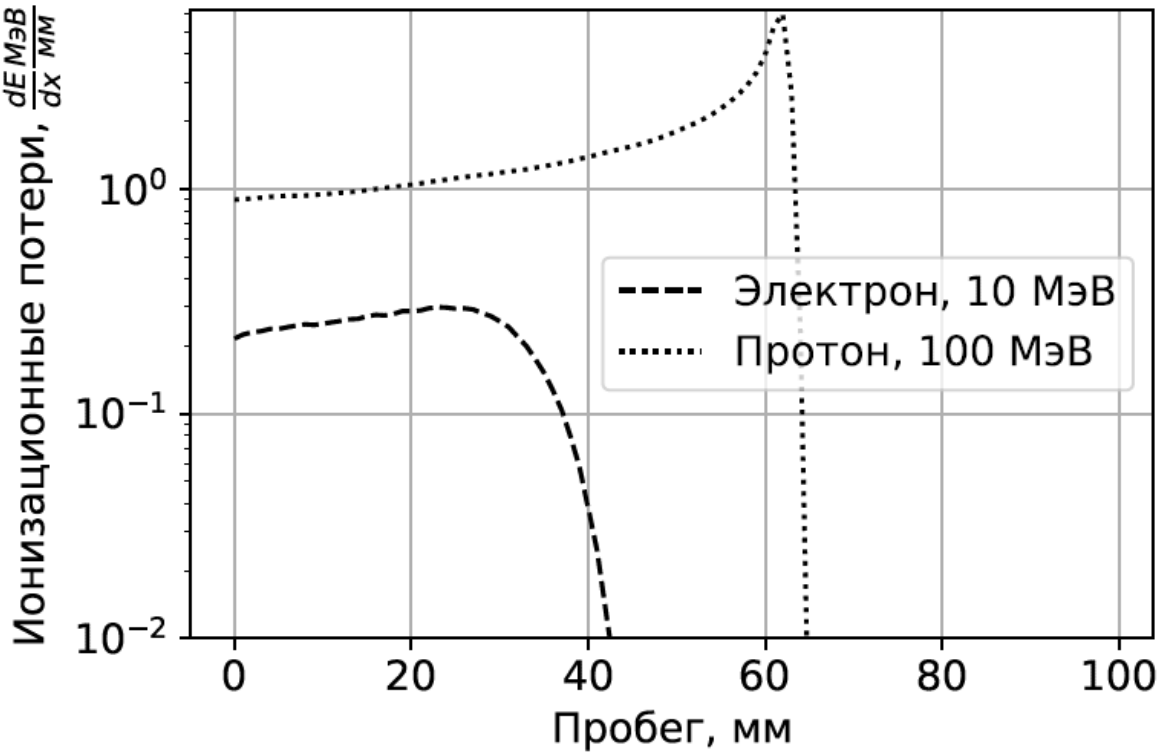


Рис. 2. Кривая ионизационных потерь протонов и электронов в сцинтилляторе

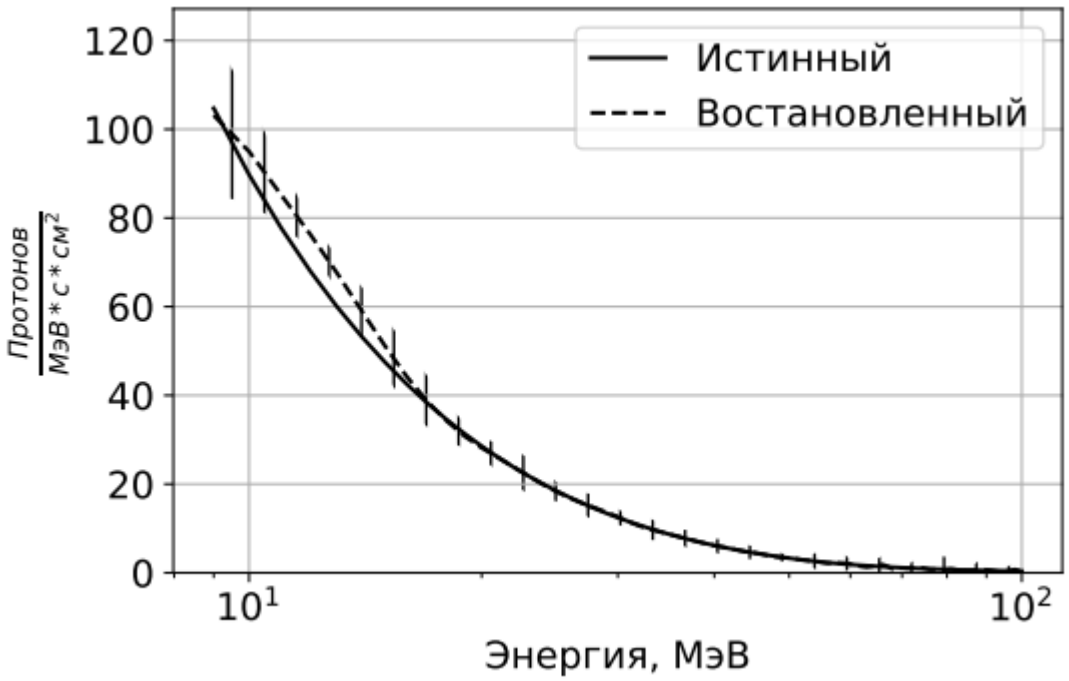


Рис. 3. Пример восстановления дифференциального спектра протонов в компьютерной модели

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 17-72-20134).

Литература

1. *Miroshnichenko L.* Solar Cosmic Rays: Fundamentals and Applications. Springer, 2015.
2. *Allison J.* [*et al.*]. Recent developments in geant4 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2016. 835:186–225.
3. *Grupen C. and Shwartz B.* Particle Detectors // Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology. Cambridge University Press, 2008.
4. *Петрукович А.А., Дмитриев А.В., and Петров В.М.* Плазменная геофизика. Т. II. Гл. Космическая радиация. Физматлит, 2008.
5. *Zelenyi M., Poliakova M., Nozik A., and Khudyakov A.* Application of turchin's method of statistical regularization // EPJ Web Conf. 2018. 177:07005.

УДК 539.1.074.55

Применение пиксельных полупроводниковых детекторов с GaAs:Cr сенсором и Timepix микросхемой для контроля потока нейтронов

Е.А. Черепанова

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

В экспериментах физики частиц важно знать радиационные условия, в которых работают детектирующие установки. Высокий уровень радиационного фона может повлечь за собой ухудшение свойств как детектора, так и считывающей электроники. Поэтому определение величины и распределения радиационного фона в зале детектора ATLAS [1] является важной задачей для расчета радиационной нагрузки и ресурса работоспособности систем установки ATLAS. Работы по моделированию карты полей такого фона ведутся с момента возникновения проекта ATLAS.

В данной работе предлагается методика мониторирования нейтронного фона с помощью пиксельных полупроводниковых детекторов излучения с GaAs:Cr сенсором [2], Timepix

микросхемой [3] и независимой системой сбора и передачи данных (система GaAsPix). Для определения абсолютной величины нейтронного потока в точке расположения детекторов необходимо знать спектр нейтронов, возникающих во время работы LHC в той же точке, что на данном этапе не представляется возможным. Тем не менее десять однотипных детекторов, установленных в различных местах подземного зала ATLAS, позволят следить за изменениями уровня радиационного фона, в том числе от нейтронов, в местах своего расположения.

Ключевым фактором является использование детекторов с сенсором из арсенида галлия, который при облучении нейтронами активируется, а затем испытывает следующие распады:

$$^{71}Ga + n \rightarrow {}^{72}Ga \rightarrow e^{-} + {}^{72}Ge\left(T_{1/2} = 14.11\,h\right),$$

$$^{75}As + n \rightarrow {}^{76}As \rightarrow e^{-} + {}^{76}Se\left(T_{1/2} = 26.26\,h\right).$$

Таким образом, детекторы регистрируют не только «первичный» фон от непосредственно столкновений пучков LHC, но и «вторичный», – случаи распада радиоактивных ядер, образовавшихся из-за облучения сенсора детектора и близлежащих материалов частицами «первичного» фона. Картина резко меняется после завершения цикла светимости LHC – «первичный» фон от столкновения пучков исчезает и остается только «вторичный» фон от распада радиоактивных ядер, индуцированных «первичным фоном». Основное преимущество GaAs перед Si заключается в том, что 100% природных Ga и As образуют радиоактивные изотопы, в то время как лишь ~3% природного кремния образуют радиоактивные изотопы под действием нейтронов.

Для анализа отбирались данные – скорость счета детектора – сразу после окончания пучка LHC во время остановок длительностью не менее трех–четырех дней. Это требование вызвано достаточно продолжительным периодом полураспада одного из радиоактивных изотопов ^{76}As – 26,26 часов. Первым шагом обработки было выделение известных каналов распада указанных изотопов GaAs в максимально удаленном от момента остановки пучка в LHC временном интервале для исключения влияния короткоживущих изотопов неизвестного происхождения, индуцированных в окружающем детектор материале нейтронами фона пучка. Данные об изменении скорости срабатывания детектора описывались суммой из двух экспонент и константы:

$$f\left(t\right) = p_0 + p_1 \exp\left(-\lambda_1 t\right) + p_2 \exp\left(-\lambda_2 t\right), \tag{21}$$

где $\lambda_n = \ln\left(2\right)/T_{1/2}\left(n\right)$, $T_{1/2}$ – период полураспада n-й компоненты. Убедившись на удаленных данных, что полученные значения параметров соответствуют известным временам полураспада радиоактивных изотопов Ga и As, временное окно, в течение которого анализировались данные, сдвигалось ближе к моменту остановки пучка. И данные описывались суммой константы и трех экспонент, две из которых имели табличные значения времен распада изотопов Ga и As, а третья компонента имела свободные параметры:

$$f\left(t\right) = p_0 + p_1 \exp\left(-\lambda_{Ga} t\right) + p_2 \exp\left(-\lambda_{As} t\right) + p_3 \exp\left(-\lambda_3 t\right), \tag{22}$$

где $\lambda_{Ga} = \ln\left(2\right)/T_{1/2}\left(Ga\right)$, $\lambda_{As} = \ln\left(2\right)/T_{1/2}\left(As\right)$, $\lambda_3 = \ln\left(2\right)/T_{1/2}\left(3\right)$ – постоянные распада ^{72}Ga, ^{76}As и неизвестной компоненты соответственно. Такая процедура позволяла более точно определить искомую величину – значение наведенной нейтронами активности в момент остановки пучка.

В ходе анализа было выяснено, что данные наилучшим образом описываются при фитировании от 15 до 80 ч. Значение погрешности измерения при подсчете суммарного вклада от изотопов Ga и As не превышало 20%. Наименьший временной интервал при котором фит хорошо сходится – 15 ч. Для более динамичной обработки хотелось бы дойти до 3–4 часов, чтобы можно было укладываться в среднее время, на которое прерываются пучки при обычном режиме работы LHC. В дальнейшем предлагается вводить дополнительные более быстрые компоненты в фитирующую функцию. Это позволит сдвинуть границы области фитирования ближе ко времени окончания пучка и, таким образом, точнее определить вклады именно от активированного вещества детектора.

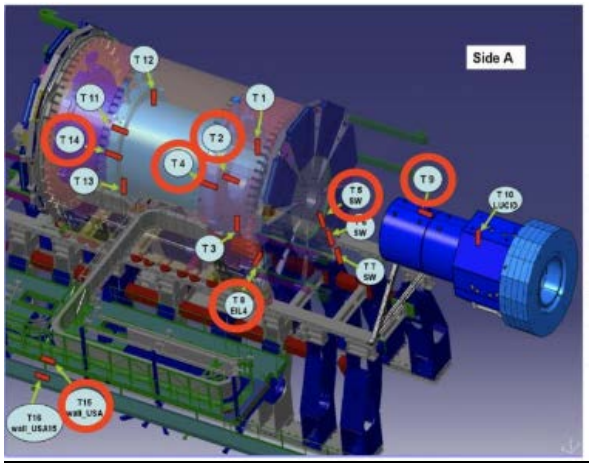


Рис. 1. Установка ATLAS. Расположение GaAs детекторов

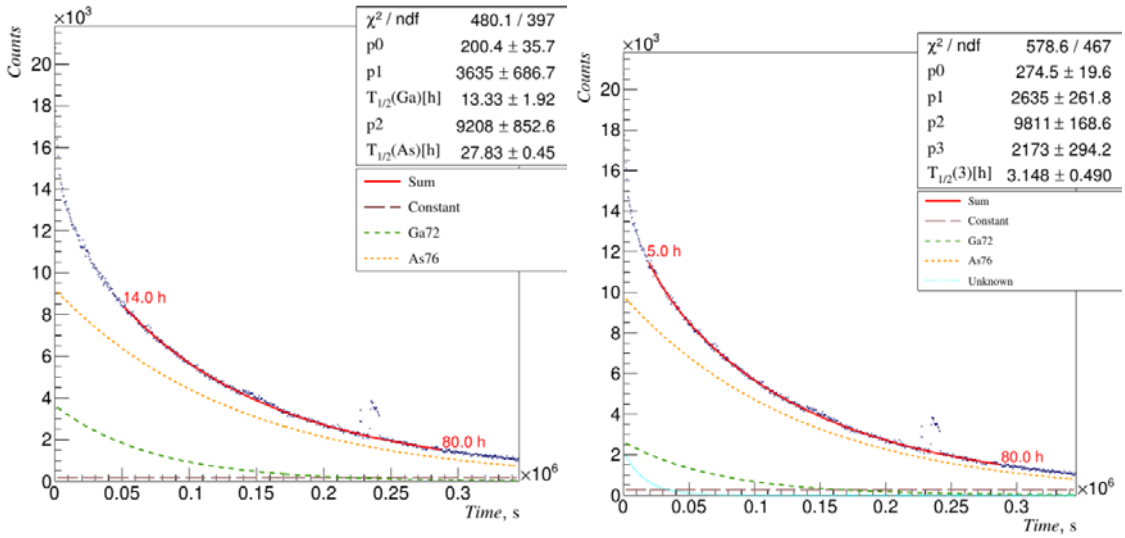


Рис. 2. Результаты фитирования двумя экспонентами (слева) и тремя экспонентами (справа)

Литература

1. *ATLAS Collaboration*. The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider. 2008. 437 p.
2. *Ayzenshtat G.* [*et al.*]. GaAs resistor structures for X-ray imaging detectors // Nucl. Inst. and Meth. A. 2002. V. 487. P. 485–494.
3. *Llopart X.* [*et al.*]. Timepix, a 65k programmable pixel readout chip for arrival time, energy and/or photon counting measurements // Nucl. Inst. and Meth. A. 2007. V. 585. P. 485–494.

УДК 53.05

Отбор взаимодействий мюонных нейтрино в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K

П.В. Симкина

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

T2K, Tokai-to-Kamioka, – эксперимент с длинной базой по изучению осцилляций нейтрино. Параметры пучка мюонных нейтрино, полученного на ускорителе J-PARC, измеряют в ближнем детекторе ND280. Нейтрино после возможных осцилляций детектируются в дальнем детекторе Super-Kamiokande.

Ближний детектор расположен в 280 м от ускорителя. Он используется для измерения энергетического спектра, направления, интенсивности, сечения и состава пучка нейтрино до осцилляций. В состав ND280 входят два детектора FGD, которые являются мишенями для нейтрино. Также они измеряют треки заряженных частиц, рожденных во взаимодействии нейтрино с веществом детектора. Кроме этого, для измерения трека, импульса и заряда частицы используются три время-проекционных камеры.

Анализ данных, полученных в ближнем детекторе, осуществляется при помощи программного обеспечения ND280. Отбор нейтринных взаимодействий через заряженный ток в FGD1 производится по следующим критериям:

1. Анализируемые данные должны быть хорошего качества.

2. Треки комбинируются по времени в восемь групп – банчей, определяемых временной структурой протонного ускорителя. Это помогает рассматривать нейтринные взаимодействия в двух разных банчах как два разных события. По этому критерию трек ставится в соответствие определенному банчу, если он отклоняется по времени от средней позиции банча не более чем на 60 нс.

3. Необходимо, чтобы в банче существовал хотя бы один отрицательный трек, который начинается во внутреннем объёме FGD1 и доходит до TPC. Это помогает убрать короткие треки, которые ненадёжно реконструируются.

4. Если конечная точка отрицательного трека (частицы с наибольшим импульсом в банче) с началом в FGD1 располагается раньше, чем его начальная позиция, то такие события не учитываются. Это позволяет уменьшить число случайных совпадений и фоновых событий, а также убрать неправильно реконструированные треки положительных частиц.

5. Энергетические потери для частицы, являющейся кандидатом в мюоны, должны удовлетворять теоретически полученным оценкам для конкретного импульса частицы.

Если какое-то из этих условий не выполнено, событие не будет учитываться.

В данной работе рассматриваются условия отбора взаимодействий мюонных нейтрино, а также его эффективность и чистота.

Литература

1. *Abe K.* [*et al.*]. The T2K Experiment // Nucl. Instrum. Meth. 2011. A659.
2. *Amaudruz P.-A.* [*et al.*] The T2K Fine-Grained Detectors // Nucl. Instrum. Meth. 2012. A696.

УДК 539.126.34

Проверка предсказаний киральной эффективной теории в эксперименте COMPASS

А.И. Мальцев

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

Квантовая хромодинамика, являющаяся истинной теорией сильных взаимодействий, не даёт возможности получать количественные предсказания для процессов при малых энергиях. Для количественных оценок в этом диапазоне энергий используются феноменологические модели.

Одной из наиболее успешных моделей является киральная эффективная теория, которая тем не менее, нуждается в контроле границ применимости.

COMPASS – универсальная установка на неподвижной мишени, находящаяся в CERN. Одним из пунктов физической программы эксперимента является проверка предсказаний киральной эффективной теории в примаковских реакциях. В докладе будут представлены промежуточные результаты по прецизионному измерению константы трёхпионного взаимодействия $F^{3\pi}$, а также другие результаты по проверке предсказаний киральной эффективной теории в эксперименте COMPASS.

Литература

1. *COMPASS Collaboration, P. Abbon* [*et al.*] The COMPASS experiment at CERN // Nucl. Instrum. Meth. 2007. A577. P. 455–518.
2. *Scherer S.* Introduction to Chiral Perturbation Theory // Adv. Nucl. Phys. 2003. V. 27. P. 277.

УДК 539.126.4

Статус измерения массы состояния $X(3872)$ в современных экспериментах в физике высоких энергий

И.В. Лилиенберг[1]***, Р.Н. Чистов***[2,3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
[3]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Рассмотрены основные работы по экспериментальному измерению массы экзотического состояния – чармониеподобного адрона, имеющего в своём составе многокварковые компоненты. Данная частица была впервые обнаружена 15 лет назад [1], однако о её составе до сих пор имеются лишь гипотезы. Масса – важная величина для установления природы данного состояния. Так, например, существуют теоретические модели, описывающие данную частицу как тетракварк, т. е. комбинацию двух кварков и двух антикварков, сильно связанных между собой [2]. Важным свойством подобных моделей является наличие сопряжённых партнёров $X(3872)$, имеющих, вообще говоря, иное значение массы. В молекулярных моделях, описывающих $X(3872)$ как состояние $D^0\overline{D}^{*0}$, связанных между собой пионным обменом [3], важной величиной является разность масс данного состояния и составляющих его очарованных мезонов, поскольку связанное пионным обменом состояние $D^0\overline{D}^{*0}$-мезонов, каждый из которых лежит на массовой поверхности, не должно лежать выше суммы масс комбинации $D^0\overline{D}^{*0}$.

$X(3872)$ был впервые обнаружен сотрудничеством Belle, работавшем на электрон-позитронном коллайдере KEKB в Японии в 2003 году, как узкий пик в инвариантной массе комбинации $J/\psi\pi^{\pm}\pi^{\mp}$ в распаде заряженного B-мезона на J/ψ-мезон, два противоположно заряженных пиона и каон [1]. В той же работе было произведено первое измерение массы нового состояния, давшее значение $M_X = 3871{,}8 \pm 0{,}7 \pm 0{,}4$ МэВ/с^2. Здесь первая ошибка статистическая, вторая систематическая. Полученное значение говорит о том, что в составе данной частицы имеются очарованные кварки. Интересен тот факт, что полученное значение в пределах ошибок измерений совпало с суммой масс D^0 и D^{*0} мезонов. Более поздние измерения улучшили точность измерения обоих величин, однако их совпадение по-прежнему имеет место. Обзор основных результатов по измерению масс данных состояний представлен в работе [4]. Данное совпадение послужило указанием на то, что оно может быть так называемая мезонной молекулой – состоянием $D^0\overline{D}^{*0}$-мезонов, связанных между собой пионным обменом.

В связи с этим представляет интерес измерение массы $X(3872)$ в распаде на два очарованных мезона. Данный процесс был рассмотрен сотрудничествами BaBar [5] и Belle [6]. В обоих анализах в явном виде восстанавливался D^{*0}-мезон, который, вообще говоря, мог лежать

вне массовой поверхности. Это привело к тому, что полученное значение для массы $X(3872)$ оказалось выше порога рождения комбинации.

Примечательно, что в анализе, выполненном сотрудничеством BaBar, масса $X(3872)$ оказалась равной $3875{,}1^{+0{,}7}_{-0{,}5} \pm 0{,}5$ МэВ/c^2, что заметно превышает значение, полученное при изучении распада на $J/\psi\pi^{\pm}\pi^{\mp}$. Данный результат послужил поводом для утверждений о наличии сопряжённого партнёра $X(3872)$ в соответствии с тетракварковыми моделями, однако он не подтвердился в последующей работе сотрудничества Belle, выполненной на большем количестве статистики.

На сегодняшний день наиболее точное измерение массы $X(3872)$ принадлежит сотрудничеству Belle [7]. В анализе, выполненном на полной статистике эксперимента Belle, набранной с 1999 по 2010 год в области энергий пучков, соответствующей массе $\Upsilon(4S)$-резонанса, восстанавливался распад заряженного или нейтрального B-мезона в $X(3872)$ и каон. Изучалось трёхмерное распределение событий по следующим параметрам: $\Delta E = E_B - E_{CM}/2$, $M_{BC} = \sqrt{E_{CM}/4 - p_B^2 c^2}/c^2$ и $M_{J/\psi\pi\pi}$. Здесь E_B – энергия восстановленного B-мезона, E_{CM} – энергия пучков в системе центра масс, p_B - трёхмерный импульс восстановленного B-мезона, $M_{J/\psi\pi\pi}$ – инвариантная масса комбинации $J/\psi\pi^{\pm}\pi^{\mp}$.

За счёт использования подгонки трёхмерного распределения сотрудничеству Belle удалось преодолеть порог значимости, необходимый для обнаружения распада нейтрального B-мезона на $X(3872)$ и короткоживущий нейтральный каон, имея всего 20 ± 5 сигнальных событий. Для измерения массы $X(3872)$ был получен результат $3871{,}85 \pm 0{,}27 \pm 0{,}19$ МэВ/c^2.

Сотрудничество Belle в работе [7] измерило также разность масс $X(3872)$, рождающихся в процессе распада заряженных и нейтральных B-мезонов. Тетракварковые модели [2] предсказывают рождение в данных распадах различных состояний, масса которых отличается на

$$\Delta M = 8 \pm 3 \text{ МэВ}/c^2, \qquad (23)$$

В представленном анализе сначала рассчитывалась разность масс $X(3872)$ и $\psi(2S)$-мезона, что приводит к сокращению систематических ошибок, дающих сдвиг средних значений сигнальных пиков. В дальнейшем рассчитывалась разность полученных разностей масс, составившая

$$\Delta M = -0{,}69 \pm 0{,}97 \pm 0{,}19 \text{ Ì ýÂ/c}^2 \qquad (24)$$

что, с одной стороны, противоречит результату (23), с другой стороны, не исключает возможности ненулевой разности масс экзотических состояний, рождающихся в распадах нейтральных и заряженных B-мезонов.

Подведём итог. Несмотря на то, что $X(3872)$ является наиболее изученным из экзотических состояний, природа его до сих пор достоверно не установлена. Важную роль в выяснении его кваркового состава играет масса $X(3872)$, в частности, находится ли она выше или ниже порога рождения комбинации $D^0\overline{D}^{*0}$; а также наличие или отсутствие разности масс при рождении в распадах заряженных и нейтральных B-мезонов. Результат (24) может быть улучшен при сокращении статистической ошибки за счёт увеличения числа сигнальных событий, особенно в распаде нейтрального B-мезона. Современные эксперименты, работающие в области физики прелестных адронов, в частности эксперименты на Большом адронном коллайдере, имеют достаточный потенциал для достижения новых результатов в измерении массы $X(3872)$.

Литература

1. *Belle Collab, Choi S.K.* [*et al.*]. Observation of a Narrow Charmoniumlike State in Exclusive $B^{\pm} \to J/\psi\pi^{\pm}\pi^{\mp}K^{\pm}$ Decays // Phys. Rev. L. 2003. V. 91. P. 262001.
2. *Maiani L., Piccinini F., Polosa A.D., and Riquer V.*. Diquark-antidiquarks with Hidden or Open Charm and the Nature of $X(3872)$ // Phys. Rev. D. 2005. V. 71. P. 014028.
3. *Tornqvist N.A.*. Isospin Breaking of the Narrow Charmonium State of Belle at 3872 MeV as a Deuson // Phys. Lett. B. 2004. V. 574. P. 210.

4. *Particle Data Group, Tabanashi M.* [*et al.*]. Review of Particle Properties // Phys. Rev. D. 2018. V. 98. P. 030001.
5. *BaBar Collab, Aubert B.* [*et al.*]. Study of Resonances in Exclusive B Decays to $\overline{D}^{(*)} D^{(*)} K$ // Phys. Rev. D. 2008. V. 77. P. 011102.
6. *Belle Collab, Aushev T.* [*et al.*]. Study of $B \to X(3872)(\to D^{*0} \overline{D}^{0}) K$ Decay. // Phys. Rev. D. 2010. V. 81. P. 031103.
7. *Belle Collab, Choi S.K.* [*et al.*]. Bounds on Width, Mass Difference and Other Properties of $X(3872) \to \pi^+\pi^- J/\psi$ Decays // Phys. Rev. D. 2011. V. 84. P. 052004.

УДК 539.171.1

Распределение спектаторной материи по заряду и массе в модели Abration-Ablation

А.О. Светличный

Московский физико-технический институт (государственный университет)

До настоящего времени было выполнено только несколько экспериментов по столкновениям ядро-ядро при ультрарелятивистских энергиях (BNL AGS, CERN SPS), в которых были измерены выходы тяжелых вторичных ядер. На коллайдерах RHIC и LHC такие измерения пока не выполнялись. В данных экспериментах основное внимание уделяется адронным взаимодействиям ядер. В столкновениях ядро-ядро часть нуклонов, находящихся в области геометрического перекрытия, испытывают взаимодействие и образуют горячую часть ядра — файербол, оставшаяся не взаимодействовавшая часть ядра называется *наблюдателем*, или *спектатором*. Достоверное определение начальных условий ядро-ядерных столкновений критически важно для исследований взаимодействий ядер, поскольку пространственная анизотропия файербола транслируется в анизотропию импульсов частиц в конечном состоянии. Надежной характеристикой начальной геометрии (анизотропии) столкновения являются различные свойства спектаторной материи.

Целью настоящей работы является теоретическое изучение свойств возбужденной спектаторной материи, образующейся в результате столкновений ультрарелятивистских ядер, после распада которой образуются тяжелые вторичные ядра.

В рамках данной работы были рассмотрены столкновения релятивистских ядер свинца с различными мишенями. Расчет производился методом Монте-Карло моделирования. Моделирование производилось с использованием двухстадийной *модели Abration-Ablation*.

В качестве модели для этапа *abration* или истирания ядра нами была использована модель Глаубера. В модели Глаубера было вычислено количество «раненых» нуклонов в каждом из ядер, а следовательно, и объем образовавшейся спектаторной материи. Изоспиновый состав спектаторной материи был вычислен с помощью гипергеометрической модели. Для вычисления энергии возбуждения были использованы (1) формула Эриксона [1] и (2) параметризация, описывающая данные коллаборации ALADIN [2].

Для моделирования этапа *ablation* или девозбуждения спектаторной материи, нами были использованы статистические модели мультифрагментации (SMM) и испарения нуклонов, реализованные в библиотеке Geant4.

В рамках данной работы было изучено влияние использованных предположений об энергии возбуждения спектаторов на конечные распределения по заряду и массе.

Нами были вычислены сечения образования спектаторной материи с определенным зарядом (рис. 1).

На рисунке изображено сечение рождения ядра-спектатора с определенным зарядом: сплошной линией — теоретически рассчитанное; сплошные круги — измеренное в эксперименте и взятое из работ [3, 4]. Так же в данной работе было вычислено сечение рождения спектаторной материи определенной массы (рис. 2).

Разработанный в ходе данной работы программный код может быть применен для вычисления выходов тяжелых вторичных ядер на коллайдерах NICA, RHIC, LHC и планируемого FCC.

Рис. 1.Сечение рождения спектаторной материи с определенны зарядом в столкновениях ядер Pb с ядрами O, Cu, Pb

Рис. 2. Сечение рождения спектаторной материи с определенной массой в столкновениях ядер Pb с ядрами O, Cu, Pb

Литература

1. *Scheidenberger C., Pshenichnov I.A., Sümmerer K.* [*et al.*]. Charge-changing interactions of ultrarelativistic Pb nuclei // Physical Review C. 2004.
2. *Botvina A.S., Mishustin I.N., Begemann-Blaich M.* [*et al.*]. Multifragmentation of spectators in relativistic heavy-ion reactions // Nuclear Physics A. 1995.
3. *Dekhissi H., Giacomelli G., Giorgini M.* [*et al.*]. Fragmentation studies of 158A GeV Pb ions using CR39 nuclear track detectors // Nuclear Physics A. 2000.
4. *Cecchini S., Giacomelli G., Giorgini M., Mandrioli G., Patrizii L., Popa V., Serra P., Sirri G., and Spurio M.* Fragmentation cross-sections of 158A GeV Pb ions in various targets measured with CR39 nuclear track detectors // Nuclear Physics A. 2002.

УДК 621.3.038.616

Коррекция динамики пучка вторичных электронов в анализаторе фазового спектра сгустков

***Д.А. Чермошенцев*[1,2], *А.В. Фещенко*[2], *С.А. Гаврилов*[1,2]**

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

Анализатор фазового спектра сгустков (BSM) – устройство, позволяющее определять продольную форму сгустков в ионных линейных ускорителях, принцип работы которого основан на регистрации интенсивности пучка электронов вторичной эмиссии [1]. Краевые поля элементов магнитной системы ускорителя, располагающихся недалеко от устройства, могут оказывать существенное влияние на динамику электронов и, как следствие, на точность измерений. В данной работе описаны методы магнитной коррекции траекторий движения электронов вторичной эмиссии в BSM.

В случае изготовления устройств BSM1 и BSM2 для ускорительного комплекса European Spallation Source (ESS) [2] было необходимо оценить влияние краевых магнитных полей квадруполя и корректирующего магнита на разрешающую способность BSM.

Для расчета напряженности краевых магнитных полей и реализации метода по уменьшению их влияния на систему была использована карта магнитных полей ESS в вертикальной плоскости сечения BSM, проходящей через его середину, а также геометрические параметры магнитных элементов.

Расчет магнитных элементов был осуществлен при помощи COMSOL Multiphysics [3] (рис. 1). Токи в катушках магнитных элементов были подобраны таким образом, чтобы значения магнитных полей в модели совпадали с реальными. Уменьшение влияния магнитных краевых полей в системе достигается за счет установки специального корпуса и экрана из стали. Влияние магнитного поля Земли в модели не учитывалось. Было разработано несколько конфигураций магнитной защиты (рис. 1).

В качестве материала для корпуса была выбрана углеродистая сталь толщиной 2 мм и относительной магнитной проницаемостью μ_r ~500. Внутренняя поверхность корпуса покрыта двумя слоями 80 мкм фольги, сделанной из аморфного сплава железа и кобальта, который имеет очень большие значения магнитной проницаемости μ_r от 250000 до 600000 и значение магнитной индукции насыщения 560 мТл.

Поведение компонент магнитного поля вдоль *X* – оси BSM, с учетом магнитной защиты, но без защитных экранов (зеленые кривые) и без учета магнитной защиты (красные кривые) для BSM1 и BSM2 соответственно приведены на рис. 2.

Лучшие результаты по уменьшению влияния магнитного поля достигаются за счет установки двух защитных магнитных экранов. Экраны представляют из себя пластины из углеродистой стали толщиной 2 мм. Поведения магнитных компонент с учетом магнитных экранов для BSM1 и BSM2 приведены на рис. 2 (синие кривые). Таким образом, напряженность магнитного поля была уменьшена до уровня магнитного поля Земли, и, следовательно, его влияние на траектории движения вторичных электронов стало пренебрежимо мало.

Влияние остаточных статических магнитных полей на траектории электронов вторичной эмиссии в *Z*-направлении можно компенсировать за счет изменения управляющего напряжения между лопатками дефлектора и магнитным полем специального корректирующего магнита. Корректирующие магниты, структура поля которых является комбинацией дипольного и квадрупольного полей, были рассчитаны и использованы в случаях разработки BSM для FRIB MSU [3] (рис. 3) и ESS. Дипольные компоненты магнитного поля двигают пучок электронов в *Y*-направлении, а квадрупольные компоненты позволяют регулировать угол наклона электронного пучка в плоскости *YZ*.

Таким образом, полученные модели позволяют на этапе предварительного моделирования устройства учесть влияние магнитных элементов на измерения BSM. Представленные выше модели использовались при разработке BSM для ускорительных комплексов CERN [5], FRIB, ESS.

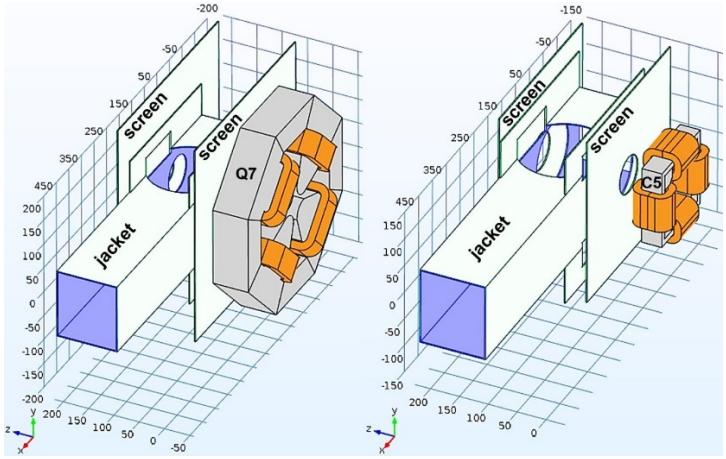


Рис. 1. 3D-модели магнитной защиты с экранами для BSM рядом с магнитами Q7 и C5

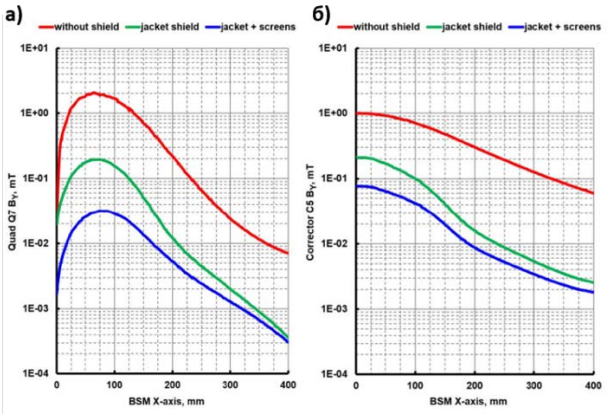


Рис. 2. График распределения B_y компоненты магнитного поля а) квадруполя Q7 вдоль оси *X* BSM1 и б) корректирующего магнита C5 вдоль оси *X* BSM2

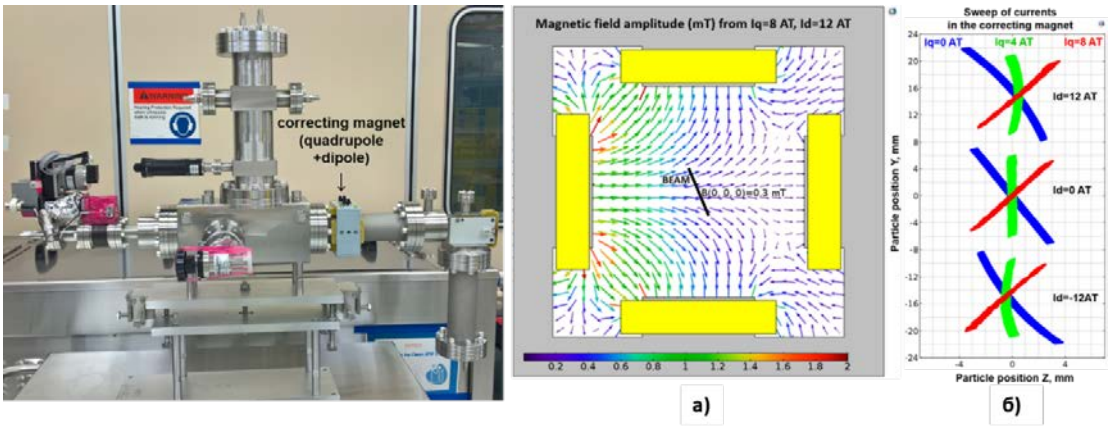


Рис. 3. Фото BSM FRIB. (a) Суперпозиция магнитных полей в корректоре. (b) Пучок электронов в плоскости выходного коллиматора для различных значений токов в катушке квадруполя *Iq* и катушке диполя *Id* (в ампер-витках)

Литература

1. *Gavrilov S.* [*et al.*] // JINST. 2017. 12. P12014.
2. http://europeanspallationsource.se/
3. www.comsol.com
4. http://frib.msu.com
5. http://home.cern/

УДК 53.01

Наблюдательные проявления аксионной темной материи

***А.В. Грибачёв*[1], *С.В. Троицкий*[1,2]**

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

Темная материя является одной из главных проблем космологии и современной физики.

В данной работе исследуются кривые вращения галактик на наличие каустик, которые могут возникать благодаря взаимодействию обычной и темной материй и проявляются в виде некоторых неоднородностей в кривых вращения [1]. Легче всего их наблюдать в районе плато. Данные каустики были предсказаны в работах Сикиви на определенных масштабах, также в них был проведен анализ кривых вращений и получены результаты, согласующиеся с теорией на уровне 3σ [2].

В данной работе проведена схожая процедура, но на другой выборке галактик. Результаты отличаются от результатов, полученных в статье [2].

Литература

1. *Sikivie P., Tkachev I. and Wang Y.* // Phys. Rev. Lett. 1995. 75. 2911; Phys. Rev. D56. 1997. 1863.
2. *Kinney W.H. and Sikivie P.* Evidence for universal structure in galactic halos. arXiv:astro-ph/9906049v1

УДК 539.123.6

Использование мишелевских электронов для идентификации пи-мезонов в ближнем детекторе ND280 эксперимента T2K

Н.С. Дмитриенко

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

В эксперименте по изучению нейтринных осцилляций T2K пучок нейтрино, произведённый на ускорителе J-PARC, направляется в дальний детектор Super-Kamiokande. Для изучения характеристик пучка до осцилляций используется ближний детектор ND280, разделенный на внеосевую и осевую части.

Внеосевой детектор расположен на расстоянии 280 м от источника пучка нейтрино и состоит из детектора нейтральных пи-мезонов, трекового детектора и калориметра. Он позволяет измерять спектр нейтрино до осцилляций, примесь электронных нейтрино в пучке мюонных, а также фиксировать фоновые процессы, чтобы в дальнейшем экстраполировать их наличие на дальний детектор Super-Kamiokande.

Трековая часть ND280 состоит из трёх время-проекционных камер (TPC), которые чередуются с двумя сцинтилляционными детекторами FGD (Fine-Grained Detector), в которых квазиупругое рассеяние нейтрино на нуклонах (CCQE) происходит посредством заряженных токов. Такое взаимодействие может происходить с рождением одного пи-мезона (CC1Pi), нескольких пи-мезонов (CCNPi) либо без них (CC0Pi). В процессах с рождением пиона энергия нейтрино не может быть восстановлена из энергии лептона, что затрудняет построение спектра нейтрино, поэтому необходимо насколько это возможно исключить данные события из анализа.

Одним из способов идентификации процесса CC1Pi ($\nu_l + N \to l^- + N' + \pi$) является поиск дополнительных треков заряженных частиц (помимо ожидаемых треков лептона и протона), так называемых *мишелевских электронов*, появляющихся в результате последовательного распада $\pi \to \mu \to e$.

Пучок нейтрино разделён на восемь групп – банчей, расстояние между которыми ~ 500 нс, а длина одного банча ~ 18 нс. Время жизни мюона (~ 2,2 мкс) много больше длины банча, поэтому появление мишелевских электронов ожидается в промежутке между банчами либо же через

несколько банчей от мюона, что является одним из критериев, по которому их отделяют от всех остальных событий.

В данной работе будет представлен процесс обнаружения мишелевских электронов в трековой части детектора ND280 и его использование для получения статистики событий CC1Pi.

Литература

1. *Abe K.* [*et al.*]. The T2K experiment // Nuclear Instruments and Methods in Physics. 2011.
2. *Amaudruz P.-A.* [*et al.*]. The T2K Fine-Grained Detecors // Nuclear Instruments and Methods in Physics. 2012.

СЕКЦИЯ «ИТЭР – ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО»

Председатель: Е.П. Велихов (д.ф.-м.н., акад. РАН, Президент НИЦ "Курчатовский институт")

Зам. председателя: А.В. Красильников (д.ф.-м.н., Директор Проектного центра ИТЭР),

В.М. Сафронов (д.ф.-м.н., зам. зав. кафедрой МФТИ)

Дата: 21.11.2018

Время: 11:00

Место: Москва, пл. ак. И.В.Курчатова, д. 1, стр. 3, Проектный центр ИТЭР

УДК 621.791.317.1

Отработка технологии быстрой вакуумной индукционной пайки бериллиевой облицовки панелей первой стенки ИТЭР

П.Ю. Пискарёв, А.А. Герваш, М.В. Хохлов, Д.А. Глазунов, А.Ю. Огурский, В.В. Рузанов, Д.В. Лянзберг

Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова

Быстрая вакуумная индукционная пайка бериллиевой облицовки является одной из ключевых технологий изготовления высоконагруженных панелей первой стенки (ППС). При выборе способа пайки необходимо было удовлетворить ряду требований: не допускается окисление поверхностей изделия; максимальная температура нагрева бериллия не должна превышать 700–800 °С, чтобы уменьшить испарение материала; время нахождения паяемых изделий в зоне температур выше 500 °С необходимо минимизировать, чтобы уменьшить потерю прочности используемой дисперсионно-твердеющей бронзы (БрХЦр); поверхность пайки имеет сложный профиль и большое количество модификаций в рамках поставочной партии ППС.

В текущем 2018 году в НИИЭФА выполняется программа квалификации технологии пайки. В рамках подготовки к выполнению квалификации, большое внимание было уделено разработке технологической оснастки и отработке технологии пайки на упрощенных макетах компонентов ППС [1]. При выборе оптимальной конструкции прижимного блока, необходимого для фиксации с заданным усилием бериллиевых плиток, была выполнена серия расчетов (рис. 1). Рассмотрены две схемы приложения фиксирующего усилия на бериллиевую плитку (состоящую из трех саб-тайлов, соединенных перемычкой толщиной 1 мм) и три характерных случая контакта плитки и опорной поверхности, соответствующих разным видам исходной погрешности формы плитки. По итогам расчетов, выбрана конструкция с тремя точками опоры, размещенными в середине каждого саб-тайла. Кроме того, определено, что при рабочем усилии прижима равном 80Н перемещения свободного участка плитки в процессе нагрева могут достигать 6–15 мкм. Это позволяет частично компенсировать погрешность формы плитки и стабилизировать капиллярный зазор в зоне пайки.

Для отработки технологии и выполнения программы квалификации разработаны специальные макеты. Первая тестовая пайка была выполнена с использованием неквалификационного макета и показала отсутствие дефектов в паяном шве по результатам ультразвукового контроля (УЗК). Во время пайки двух следующих квалификационных макетов также было достигнуто хорошее качество паяных швов, но выявлена проблема с нарушением герметичности биметаллического соединения (рис. 2), полученного горячим изостатическим прессованием (ГИП).

В рамках рабочей группы, по результатам каждой пайки проводился производственный анализ, где анализировались достигнутые результаты, полученные отклонения и их возможные причины. В результате была сформирована структура гипотез о возможных причинах брака (рис. 3).

Оптимизация технологической оснастки, а также оптимизация конструкции квалификационного макета не оказали существенного влияния на образование брака. Проведённый расчет выявил локальный максимум напряжений, находящийся в углах макета, а также прямую зависимость уровня напряжений от скорости нагрева в процессе пайки. Снижение скорости быстрого нагрева с 1,2 °С/сек до 0,8 °С/сек позволило снизить напряжения и избежать последующего брака, связанного с нарушением герметичности. Дальнейшие исследования в рамках структуры гипотез, выявили наличие хрупкого слоя в диффузионном биметаллическом соединении. Данный слой является зоной распространения трещины и приводит к хрупкому разрушению по соединению. Таким образом, дальнейшая оптимизация была направлена на улучшение химического состава в зоне диффузионного соединения биметалла, полученного ГИП.

К текущему моменту спаяно шесть квалификационных макетов, включая два бракованных по биметаллическому соединению. В результате успешно припаяны 72 бериллиевые плитки, что составляет площадь пайки более 61 × 10^3 мм^2. При этом был обнаружен только один допустимый по критериям дефект на краю плитки площадью 2,75 мм^2. Таким образом, уровень надежности разработанной технологии пайки на текущий момент можно оценить в 99,9 %.

Один из наиболее объективных методов контроля качества пайки – это проведение тепловых испытаний макетов [1]. Испытания двух макетов были выполнены на стенде «Цефей-М», параметры испытаний: плотность мощности на облицовке 4,7 МВт/м^2; 15 000 циклов нагружения в режиме 15 сек – импульс, 15 сек – пауза; вода в каналах охлаждения макета с параметрами: 70°С, 3 МПа, 2 м/с. Оба макета успешно прошли все циклы тепловых испытаний (рис. 4), и полученные результаты полностью удовлетворили всем критериям программы испытаний.

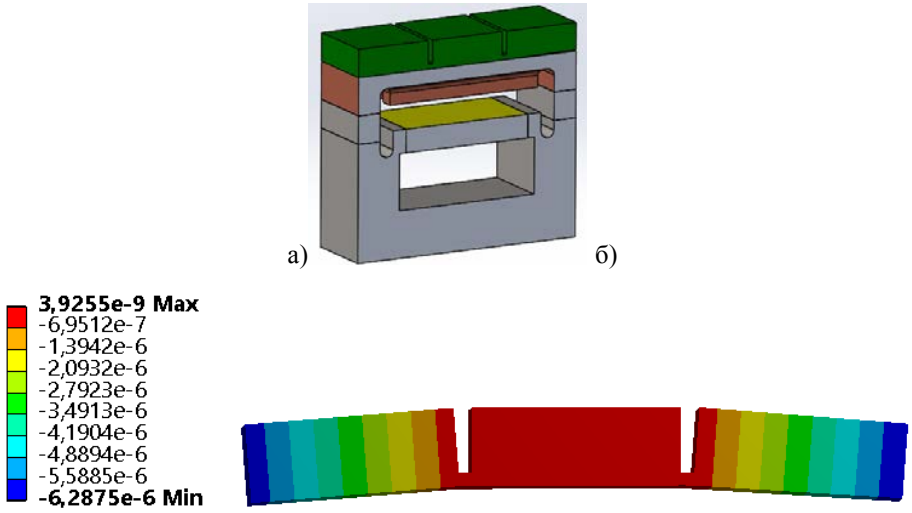


Рис. 1. а) Расчетная 3D-модель, б) перемещения свободных концов плитки под действием усилия фиксации

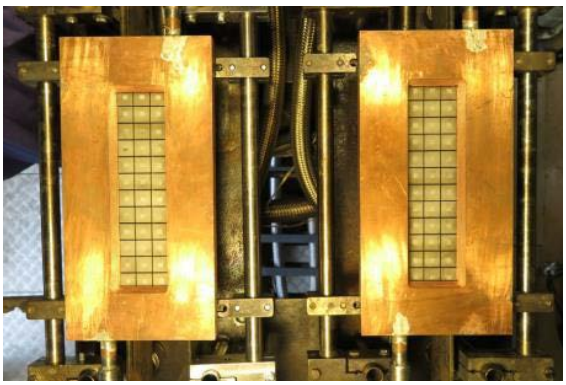


а) б)

Рис. 2. а) Макет с трещиной по биметаллическому соединению; б) УЗК-дефектограмма



Рис. 3. Структура гипотез о возможных причинах брака



а) б)

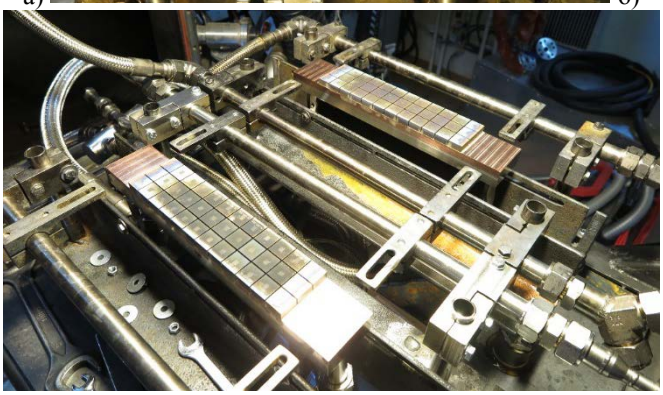


Рис. 4. а) Макеты, готовые к ТИ; б) макеты после ТИ

Литература

1. *Пискарев П.Ю., Огурский А.Ю., Герваш А.А., Мазуль И.В.* Подготовка к выполнению программы квалификации технологии вакуумной индукционной пайки бериллиевой облицовки компонентов реактора ИТЭР // Наукоемкие технологии в машиностроении. Брянск: Из-во БГТУ, 2018(8). 33–41.

УДК 533.9.082

Тестирование макета импульсного рефрактометра (МИР) ИТЭР на токамаке Т-11М

К.Ю. Афонин

Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
УТС-Центр
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Собран и протестирован макет прибора для измерения средней электронной плотности плазмы в токамаке Т-11М (большой радиус плазмы R – 0,7 м, малый радиус плазмы a – 0,2 м, длительность разряда около 200 мс, тороидальное поле B_T – 1 Т, ток плазмы I_p – 70–100 кА) методом импульсной времяпролетной рефрактометрии. Зондирование плазмы проводилось на обыкновенной волне (электрическое поле волны параллельно магнитному полю B_T). Проведены измерения времени задержки в плазме с различными конфигурациями излучающей и принимающей антенн. Результаты,

полученные с помощью макета импульсного рефрактометра, сравнивались с результатами измерений штатного Коттона–Мутона поляриметра (КМП). Расчет калибровочных кривых зависимости времени задержки зондирующего сигнала от средней плотности плазмы проводился в предположении квазипараболического профиля электронной плотности плазмы на токамаке Т-11М вида

$$n_e(x) = n_{e0}\left(1-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right)^{\alpha},\ n_{cp} = \frac{1}{l}\int_l n_e(x)dx,$$

где $n_e(x)$ – распределение плотности плазмы вдоль линии зондирования; a – радиус плазменного шнура; l – длина линии зондирования; коэффициент α характеризует степень «пикированности» распределения электронной плотности в плазме (коэффициент параболичности); n_{cp} – средняя плотность плазмы вдоль линии зондирования. При этом использовалась модель холодной плазмы ($T_{e\max}$ = 0.3 кэВ $<< m_e c^2$ – энергия покоя электрона). Расчет времени задержки проводился по известным формулам [1]:

$$\tau = \frac{d\Phi}{d\omega} = \frac{1}{c}\int_l \mu(x)dx + \frac{\omega}{c}\int_l \frac{d\mu}{d\omega}(x)dx,$$

$$\mu(x) = \sqrt{1-\left(\frac{\omega_p(x)}{\omega}\right)^2},\ \omega_p = \left(\frac{n_e(x)e^2}{\varepsilon_0 m_e}\right)^{\frac{1}{2}},\ \omega = 2\pi f,$$

где τ – время задержки импульса; μ – коэффициент преломления плазмы; ω_p – плазменная частота; f – несущая частота зондирующей волны; e, m_e – заряд и масса электрона соответственно. В данной работе использовалось значение α = 1,5, определенное ранее для аналогичных режимов токамака Т-11М [2].

Геометрия зондирования, использованная в экспериментах на Т-11М, представлена на рис. 1. Линия зондирования КМП проходит вертикально через центр плазмы со смещением в 1 см в сторону центра установки. Возможные линии зондирования рефрактометра определялись конфигурацией антенн, представленных на рис. 1. В каждом эксперименте использовалась одна передающая и одна приемная антенны из пяти возможных антенн рефлектометра, расположенных со стороны слабого магнитного поля.

На рис. 2 показаны результаты измерений средней электронной плотности в течении разряда № 45484 на токамаке Т-11М с использованием макета импульсного рефрактометра и штатного КМП. На этом рисунке видно, что имеется достаточно хорошее соответствие полученных результатов. Разницу в полученных результатах можно объяснить разной геометрией зондирования КМП и МИР.

Следует отметить, что представленный разряд нетипичный для токамака Т-11М, он достаточно короткий (~60 мс) и заканчивается срывом тока, что сопровождается быстрым падением электронной плотности плазмы. Поскольку обе применяемые методики являются «бессбойными», то обе диагностики сработали достаточно надежно. В работе подробно описывается схема и методика проведения экспериментов, обсуждаются полученные результаты.

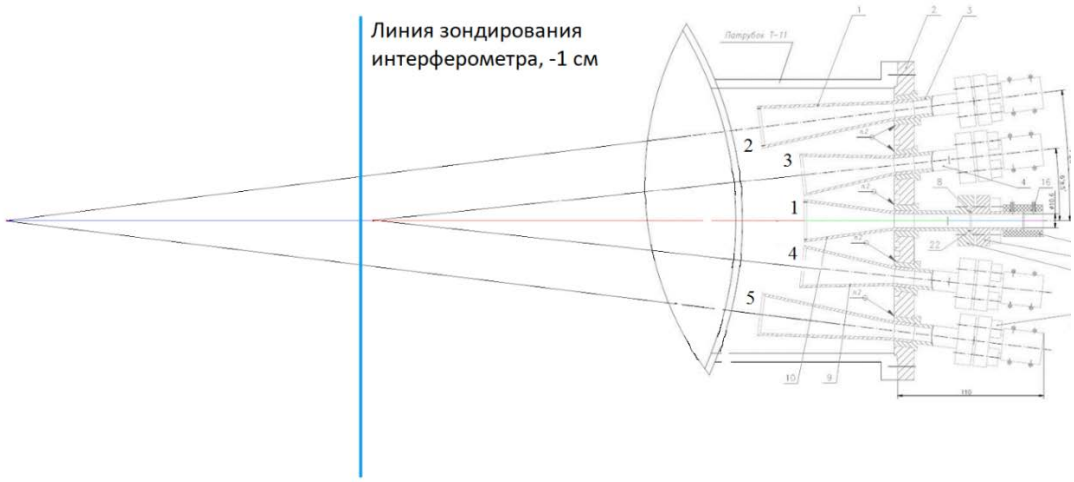


Рис. 1. Варианты зондирования, использованные при измерениях

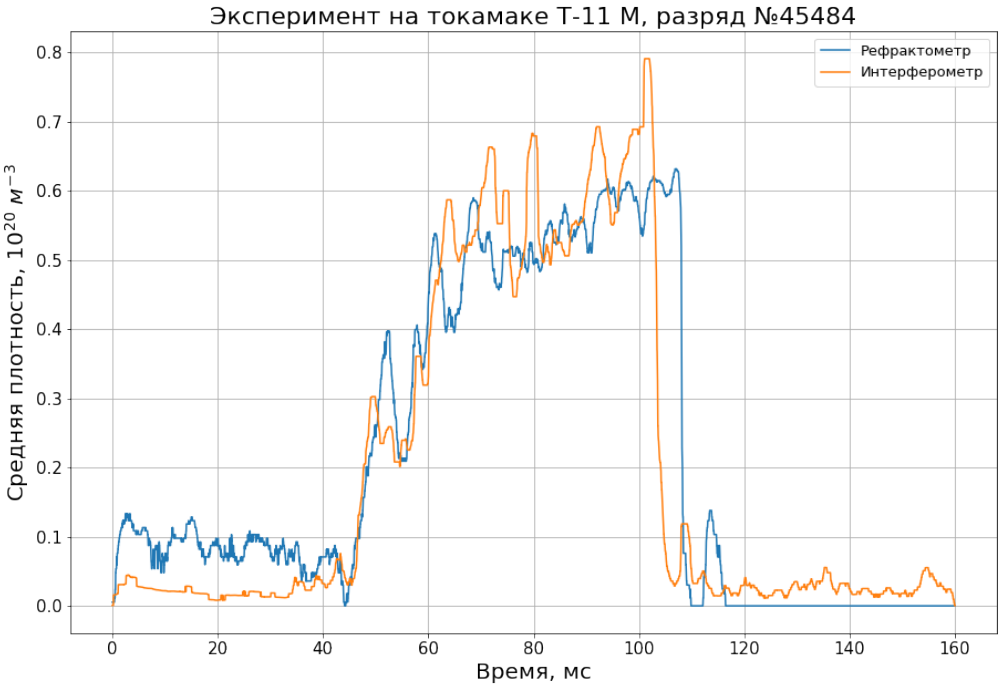


Рис. 2. Разряд № 45484. Средняя плотность, измеренная штатным КМП и МИР

Литература

1. *Гинзбург В.Л.* Распространение электромагнитных волн в плазме. Государственное издательство физико-математической литературы, 1960.
2. *Петров В.Г., Петров А.А., Малышев А.Ю.* [*и др.*]. Измерение динамики электронной плотности в токамаке Т-11М с помощью микроволновых методов // Физика плазмы. Т. 30. № 2. 2004.

УДК 533.9.082

Экспериментальная отработка компонентов макета рефрактометра ITER

А.Ю. Афонин

Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
УТС-Центр
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Описывается макет дифференциального рефрактометра ИТЭР [1], который планируется применить для измерения средней электронной плотности плазмы в токамаке Т-11М (большой радиус плазмы R – 0,7 м, малый радиус плазмы a – 0,2 м, длительность разряда около 200 мс, тороидальное поле B_T – 1 Т, ток плазмы I_p – 70–100 кА). Макет рефрактометра собран на основе двух генераторов микроволнового излучения с разностной частотой Δf = 900 МГц и фазового детектора/квадратурного демодулятора. Также была изготовлена плата на основе делителя частоты, работающая в диапазоне 0,1 – 1,1 ГГц. Предварительное тестирование, проведенное на стенде, показало, что макет рефрактометра работает корректно (см. рис. 1, на котором показано, как изменяется напряжение, пропорциональное разности фаз (10 мВ/градус) в зависимости от разности длин опорного и сигнального плеч рефрактометра, длина сигнального плеча изменялась путем изменения расстояния между микроволновыми детекторами и сигнальным детектором). Расчет калибровочных кривых зависимости времени задержки зондирующего сигнала от средней плотности плазмы проводился в предположении квазипараболического профиля электронной плотности плазмы на токамаке Т-11М вида

$$n_e(x) = n_{e0}\left(1-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right)^{\alpha},\ n_{cp} = \frac{1}{l}\int_l n_e(x)dx,$$

где $n_e(x)$ – распределение плотности плазмы вдоль линии зондирования; l – длина линии зондирования; коэффициент α характеризует степень «пикированности» распределения электронной плотности в плазме (коэффициент параболичности), $n_{cp}(x)$ – средняя плотность плазмы вдоль линии зондирования. При этом использовалась модель холодной плазмы ($T_{e\max}$ = 0.3 кэВ << $m_e c^2$ – энергия покоя электрона). В данной работе при расчете калибровочных зависимостей использовалось значение α = 1,5, определенное ранее для аналогичных режимов токамака Т-11М [2].

В работе подробно описывается схема макета дифференциального рефрактометра, описаны его компоненты, подробно описана методика проведения экспериментов, обсуждаются полученные результаты.

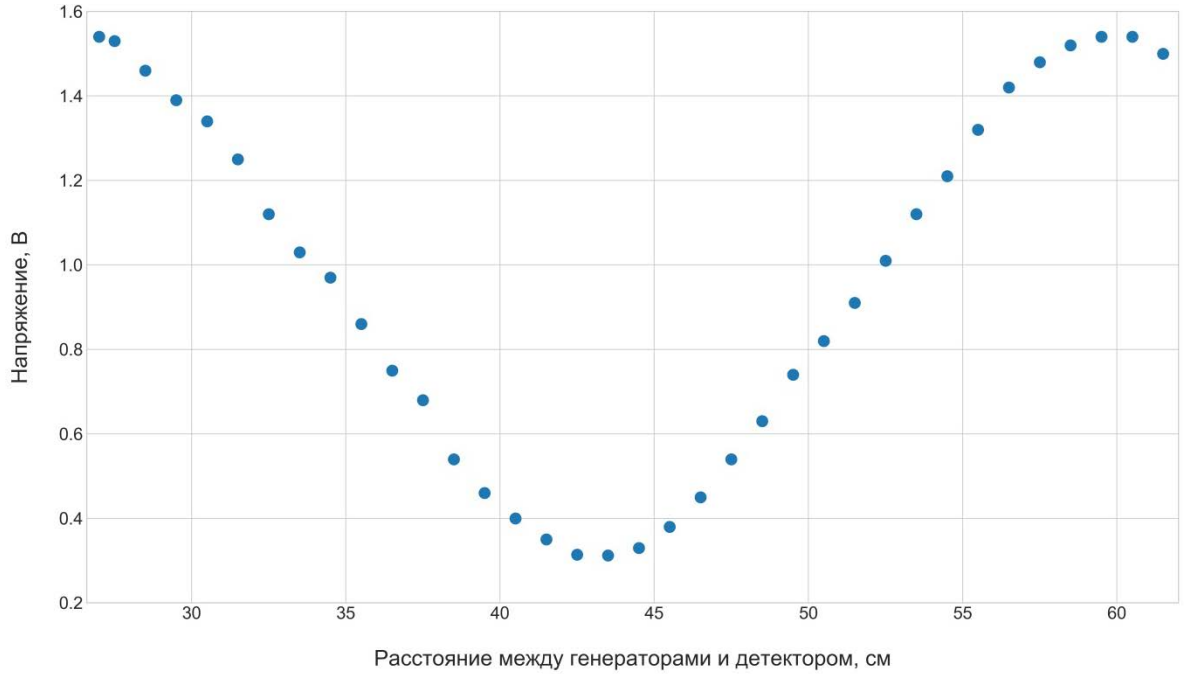


Рис. 5. Зависимость напряжения на выходе фазового детектора от расстояния между микроволновыми генераторами и сигнальным детектором

Литература

1. *Petrov A.A., Petrov V.G.* Time-of-Flight Refractometry for Robust Line Integral Electron Density Measurements and Control // ITER. Rev. Sci. Instrum. 2003. 74. P. 1465–1469.
2. *Петров В.Г., Петров А.А., Малышев А.Ю.* [*и др.*]. Измерение динамики электронной плотности в токамаке Т-11М с помощью микроволновых методов // Физика плазмы. 2004. Т. 30. № 2.

УДК 533.924

Влияние магнитного поля на эрозию металлов, обусловленную расплескиванием и разбрызгиванием расплава при воздействии мощных потоков плазмы

И.М. Позняк[1,2,3]***, В.М. Сафронов***[1,2,3]***, В.Ю. Цыбенко***[1,2]
[1]Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Учреждение Росатома «Проектный центр ИТЭР»

Предполагается, что во время быстрых плазменных процессов (ELM-событий и срывов) защитные покрытия дивертора и первой стенки токамака ИТЭР будут подвергаться воздействию мощных тепловых потоков (до нескольких десятков ГВт/м^2 [1]). Такие условия невозможно воспроизвести на существующих токамаках, поэтому в лабораторных экспериментах используют плазменные ускорители, мощные электронные и ионные пучки, лазерные установки.

Ранее на плазменном ускорителе КСПУ-Т проводилось облучение металлических мишеней потоками плазмы с параметрами, ожидаемыми при быстрых процессах в ИТЭР [2]. Было показано, что воздействие плазмы вызывает сильную эрозию материалов. Основным механизмом эрозии является перемещение расплавленного слоя вдоль поверхности. Вследствие перемещения расплава на поверхности образуется кратер эрозии, покрытый волнами. Эрозия такого типа вызывает уменьшение толщины защитных пластин дивертора и первой стенки ИТЭР, что ведет к снижению их ресурса.

Существует несколько гипотез о движении расплава, включающих разную природу сил и механизмов, которые могут быть ответственны за перемещение расплава. Так в статье [2] представлена гипотеза о перемещении расплава градиентом давления плазмы; в расчетно-теоретических 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 механизм воздействия приповерхностного плазменного потока на волны расплавленного слоя. Все представленные теории и гипотезы требуют развития и дальнейшей экспериментальной проверки.

В рамках представленной работы исследовалось влияние магнитного поля на перемещение расплава. Мишени из нержавеющей стали AISI 304 (аналог 08Х18Н10) подвергались однократному плазменному облучению при тепловой нагрузке Q = 1,5 МДж/м^2 (на оси потока) и длительности воздействия 1 мс. За одной мишенью устанавливался неодимовый магнит диметром 100 мм и толщиной 10 мм. Величина поля у поверхности составляла 0,1 Тл (рис. 1).

После плазменного облучения проводилось измерение профилей поверхности мишеней – рис. 2. Видно, что при наличии поля вынос материала к периферии кратера эрозии становится меньше, что означает уменьшение скорости расплава.

Сравнивая снятые с увеличением участки поверхности, рис. 3, можно заметить, что в присутствии магнитного поля нет выноса струй и капель расплава на неоплавленную поверхность. По-видимому, это также связано со снижением скорости расплавленного слоя.

Снижение скорости расплава может быть вызвано неоднородностями магнитного поля. Движение материала через область с изменяющимся магнитным потоком, вызовет токи Фуко, которые, взаимодействуя с полем, будут препятствовать перемещению жидкого металла. Другой причиной снижения скорости расплава может оказаться влияние магнитного поля на течение приповерхностной плазмы, из-за чего меняются условия воздействия плазмы на расплав. К примеру, если скорость плазмы вдоль поверхности мишени становится меньше (плазма «тормозится» магнитным полем), это может привести к снижению тангенциальной силы, разгоняющей расплав, и в конечном счете – к уменьшению его скорости. Необходимо также упомянуть гипотезу о действии силы Ампера, которая может возникать в дополнительном магнитном поле (поле магнита) при прохождении токов с электродов ускорителя через плазму и мишень на стенки вакуумной камеры установки. В дальнейших экспериментах предполагается провести проверку перечисленных гипотез.

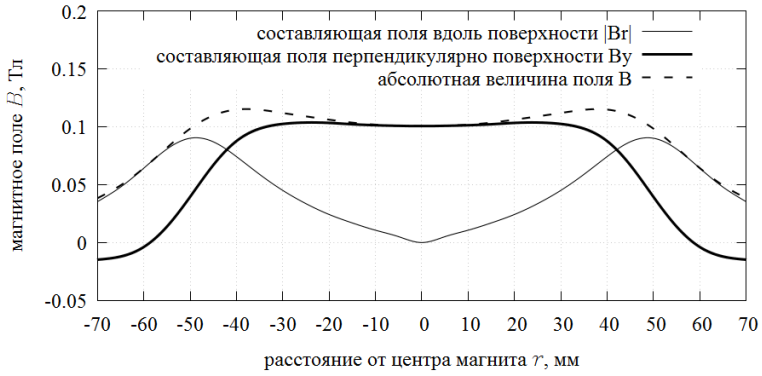


Рис. 1. Распределение магнитного поля вдоль поверхности мишени и профили поверхности мишеней

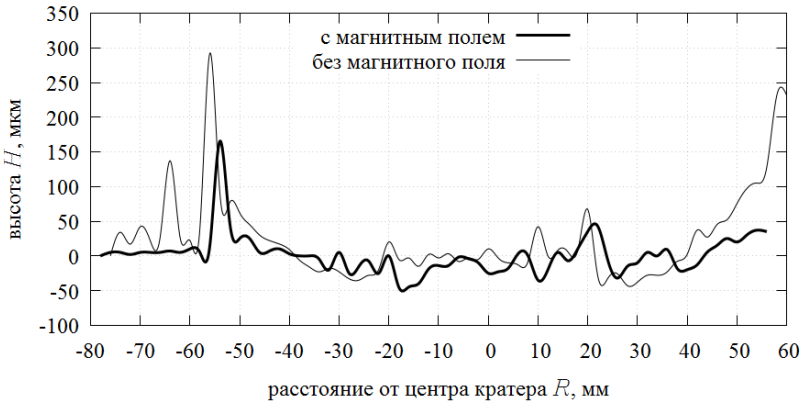


Рис. 2. Профили поверхности мишеней после облучения плазмой



Рис. 3. Периферийные участки поверхности мишеней: слева – облученная с магнитным полем, справа – без магнитного поля. Диаметр отверстия – 7 мм

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.
2. *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.
4. *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 621.039.634

Макет испытательного модуля бланкета с керамическим бридером и жидкометалическим теплоносиетелм для стендовых испытаний

***С.А. Козлов*[1], *М.Н. Свириденко*[1], *А.Ю. Лешуков*[1], *А.В. Размеров*[1], *А.А. Хромов*[1], *И.Р. Кириллов*[2], *Д.А. Перцев*[2], *Д.М. Обухов*[2]**

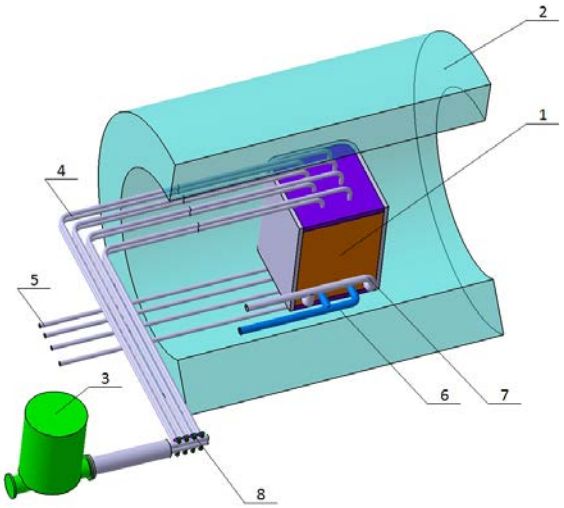
[1]Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н.А. Доллежаля
[2]Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова

На основании технического задания на опытно-конструкторскую работу АО «НИКИЭТ» совместно с АО «НИИЭФА» им. Д.В. Ефремова разрабатывается конструкция макета испытательного модуля бланкета (ИМБ) ИТЕР с имитатором керамического бридера и жидкометаллическим теплоносителем, для исследования гидродинамики и теплообмена в тракте свинцово-литиевой эвтектике (СЛЭ) с учетом МГД эффектов, возникающих в сильных магнитных полях.

В данной работы представлено расчетное обоснование конструкции макета ИМБ. Предложены два варианта конструкции элемента имитатора нагрева керамического бридера (ИКБ) с различной конфигурацией оребрения стенок корпуса. Представлен вариант ИКБ позволяющий обеспечить необходимое распределение подогревов в каналах СЛЭ. Подобран органический теплоноситель для заданного режима работы макета, выполнен сопряженный теплогидравлический анализ для режима течения СЛЭ при заданных тепловых мощностях с целью оценки распределения температур в конструкции и определения гидравлических параметров органического теплоносителя с использованием CFD кода ANSYS FLUENT.

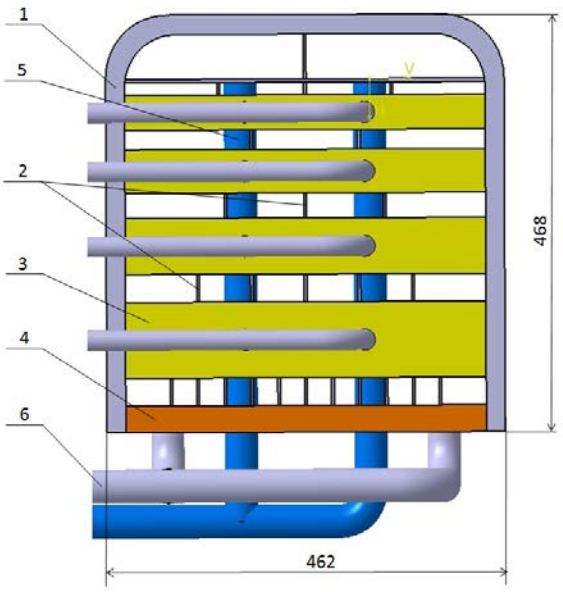
Были получены подогревы в каналах $Pb_{83}Li_{17}$, скорректирован расход жидкого органического теплоносителя для равномерного подогрева в каналах $Pb_{83}Li_{17}$

Проведен анализ напряженно-деформированного состояния (НДС) конструкции с использованием многофункционального кода ANSYS APDL макета ИМБ. Максимальное значение эквивалентных напряжений достигается на стенке вакуумного зазора со стороны подъемного канала и составляет 463 МПа и критерий immediate plastic collapse and plastic instability не выполняется, предложен вариант позволяющий снизить напряжения. Полученные результаты подтверждают работоспособность макета.



1 – макет ИМБ; 2 – магнит; 3 – насос тракта ИКБ; 4 – подводящие трубы тракта ИКБ; 5 – отводящие трубы тракта ИКБ; 6 – отводящие трубы тракта СЛЭ; 7 – подводящие трубы тракта СЛЭ; 8 – клапаны

Рис. 1. Общий вид макета испытательного модуля бланкета



1 – первая стенка корпуса; 2 – полоидальные перегородки каналов СЛЭ; 3 – ИКБ; 4 – тыльная плита; 5 – отводящие трубы тракта СЛЭ; 6 – подводящие трубы тракта СЛЭ

Рис. 2. Общий вид макета испытательного модуля бланкета, вид сверху (верхняя и нижняя крышки корпуса не показаны)

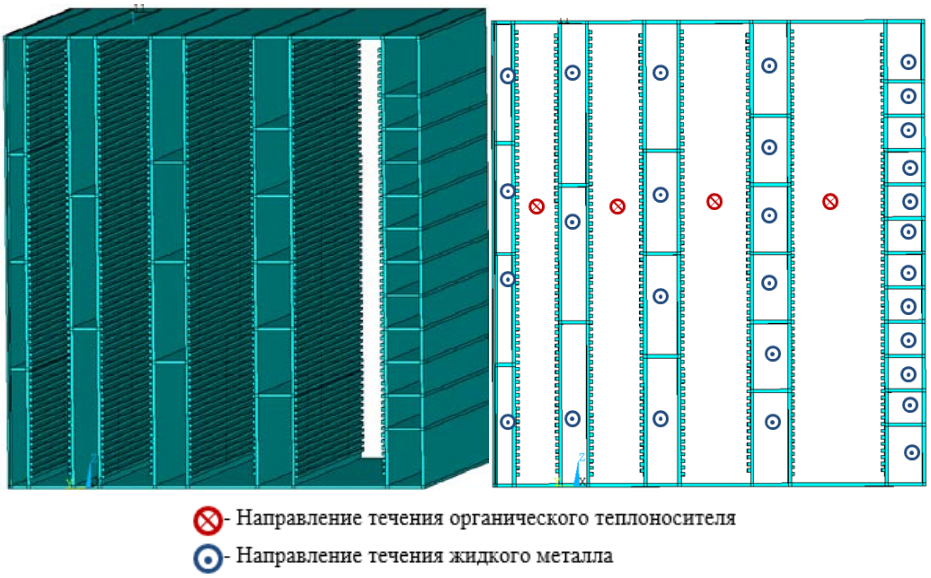


Рис. 3. Имитаторы канистр бридера с оребрением в полоидальном направлении

Таблица 1

Геометрические параметры трактов

Элемент тракта	d_r, м	Площадь, м^2	Периметр, м	Расход Кг/с
ИКБ 1	0.0294	0.0125	1.712	5,3
ИКБ 2	0.0387	0.0167	1.732	4,3
ИКБ 3	0.0513	0.0226	1.760	2,0
ИКБ 4	0.0705	0.0318	1.810	2,0

Геометрические параметры ребер:
Радильный размер – 0.003 м
Толщина 0.003 м
Количество ребер 540

Таблица 2

Подогрев в каналах тракта СЛЭ, °С

Элемент тракта		Подогрев, °С
Канал тракта СЛЭ	Расположение подканала	Расход 13,6 кг/с (64 м^3/ч)
1	периферия	31,7
	центр	30,1
2	периферия	36,2
	центр	33,1
3	периферия	34,8
	центр	31,1
4	периферия	36,1
	центр	31,2
5	периферия	39,2
	центр	34,4

Литература

1. Техническое задание на опытно-конструкторскую работу «Макет испытательного модуля бланкета», 2017.
2. АО «НИКИЭТ». «Модуль экспериментальный», пояснительная записка 189.2.000 ПЗ, этап 2, 2016.

УДК 533.924

Моделирование дифракции синхротронного излучения в мозаичном монокристалле

С.Р. Казанцев, А.С. Аракчеев

Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера
Новосибирский государственный университет

В термоядерном реакторе ожидаются интенсивные импульсные тепловые и плазменные нагрузки на вольфрамовую стенку дивертора, что приведет к возникновению пластических деформаций, и как следствие, к возникновению трещин в диверторе и его разрушению [1]. Для исследования механизма возникновения данных деформаций необходимо уметь измерять их динамику во время импульсной тепловой нагрузки. В настоящее время в ИЯФ СО РАН идет разработка динамической диагностики пластических деформаций на основе метода быстрой дифрактометрии [2]. Данный метод заключается в измерении дифракционной картины рассеянного на образце монокристалла вольфрама пучка синхротронного излучения (СИ), и последующем восстановлении деформации образца по форме дифракционного пика. В монокристалле происходит отражение СИ от кристаллических плоскостей. При удовлетворении условию Вульфа-Брэгга, рассеянное излучение будет интерферировать, и детектор зарегистрирует результат рассеяния. При равномерном по поверхности нагреве монокристалла, будет происходить его расширение, что приведет к искривлению кристаллической плоскости, а значит форма дифракционного пика, регистрируемом детектором, будет изменяться. Того же эффекта искривления кристаллической плоскости можно добиться с помощью вращения образца, в результате которого имеет смысл зарегистрировать некий набор базисных функций, который можно использовать для решения задачи восстановления деформаций в образце по дифракционной картине. Однако прежде чем пробовать решать обратной задачу, нужно уметь решать прямую задачу-задачу о рассеянии СИ на монокристалле вольфрама. Работа проводилась в режиме дифракции на просвет (геометрия Лауэ), в модели учитывались поглощение СИ и мозаичность образца монокристалла вольфрама, также использовалось приближение кинематической теории дифракции. В пакете Wolfram Mathematica была написана программа для моделирования процесса рассеяния пучка СИ в мозаичном монокристалле вольфрама для расчета аппаратных функций для задачи восстановления деформации образца по форме дифракционного пика. Были проведены численные расчёты и сравнение с экспериментальными данными, которое выявило расхождение по форме интерференционного пика, было учтено за счет использования более точной функции распределения, описывающей разориентированность кристаллической структуры монокристалла. Также в работе представлены первые результаты по восстановлению распределения деформаций в образце при импульсном нагреве.

Литература

1. *Ikeda K*. Progress in the ITER Physics // Nuclear Fusion. 2007. V. 47. N 6.
2. *Arakcheev A.S.* [*et al.*]. Status of Dynamic Diagnostics of Plasma Material Interaction Based on Synchrotron Radiation Scattering at the VEPP-4 Beamline // Physics Procedia. 2016. V. 84. P. 184–188.

УДК 533.924

Свойства продуктов эрозии вольфрама при его облучении 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-ы, 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/м^2 [1], что соответствует фактору теплового воздействия F = Q/t^{0,5} F = 2500 МДж/м^{2}с^{0,5} и существенно превосходит пороги плавления материалов.

Ожидается, что воздействие мощных плазменно-тепловых потоков повлечет эрозию защитных пластин и образование продуктов эрозии в виде испаренного вещества и пыли (металлических капель). Поступление примесей в горячую плазму вызовет 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.

Так как существующие токамаки не обладают мощностью, достаточной для моделирования переходных процессов в ИТЭР, испытания материалов проводят на плазменных ускорителях, лазерах, электронных и ионных пучках. В представленной работе эксперименты были выполнены на импульсной плазменной 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-ов в ИТЭР [4].

В рамках представленной работы мишень из вольфрама в виде плоской пластины с размерами 6 см на 12 см облучалась потоками водородной плазмы длительностью 25 мкс, плотностью тепловой энергии до 10 МДж/м^2 (F ≤ 2000 МДж/м^{2}с^{0,5}) и энергией ионов ≈ 1,5 кэВ. Взаимодействие плазмы с мишенью происходило в продольном магнитном поле величиной 1,5 Тл.

Данные, полученные в эксперименте, показывают, что в диапазоне тепловых нагрузок от 1 до 2 МДж/м^2 при длительности воздействия t_{pl} = 25 мкс светящийся вблизи поверхности плазменный слой формируется менее чем за 1,5 мкс и существует на протяжении всего времени воздействия. Присутствие продольного магнитного поля ограничивает распространение мишенной плазмы поперек силовых линий. Отчетливо регистрируется выброс вольфрамовых капель, вылетающих изотропно с поверхности мишени. Скорость капель составляет v_{dr} ≈ 5 – 10 м/с.

Литература

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 3937

Оценка предельно допустимых деформаций в системе сбора света диагностики «Активная спектроскопия ИТЭР» с помощью программного пакета Zemax

***А.С.Вердиян*[1], *А.В.Бондаренко*[1,2], *В.В. Серов*[2], *С.Н. Тугаринов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Учреждение Росатома «Проектный центр ИТЭР»

Диагностическая система «Активная спектроскопия ИТЭР» предназначена для измерений параметров плазмы методами спектроскопии [1–5]. В плазму инжектируют пучок нейтральных атомов. В результате перезарядки на этих нейтралах полностью ионизованные ионы плазмы приобретают электроны и становятся способными излучать свет в видимой области спектра. Изображение светящейся области – плазменного шнура – через систему зеркал и линз передаётся на входной приёмный торец оптоволоконного жгута. Здесь из изображения вдоль шнура вырезаются поперечные к оси полоски, которые передаются в виде световых сигналов к набору спектрометров. По допплеровскому уширению и сдвигу спектральных линий измеряют

температуру ионов и скорость движения плазмы как целого, по интенсивности излучения – концентрацию примесей.

Качество изображения плазменного шнура – резкость, контрастность, световой поток определяют основные характеристики – чувствительность диагностики, временное и пространственное разрешение. Задачей данной работы было численное моделирование передачи изображения плазменного шнура на приёмный торец оптоволоконного кабеля. Требовалось вычислить характеристики изображения точечного источника для исходного состояния оптической системы и сравнить их с таковыми для случая расчётных тепловых перемещений зеркал в режиме нормальной работы установки.

Длина трассы лучей в системе сбора света от объекта до изображения на Рис.1 составляет около 9,5 м, причём более 8 м из них проходит в вакууме. Компоненты системы, расположенные в вакууме, подвержены воздействию потоков фотонов и частиц из плазмы. В рабочем режиме они испытывают циклические тепловые нагрузки - нагрев в течение 500 с последующим охлаждением в течение 1500 с. Наибольшие тепловые нагрузки приходятся на первое зеркало, которое смотрит непосредственно в плазму.

Численное моделирование, проведенное сотрудниками СПб-Политехнического университета, показало, что в рабочем режиме температура поверхности первого зеркала меняется в пределах 100–200 ^{0}C, а температура узла крепления – 100–500 ^{0}C. При этом в системе координат, связанной с зеркалом, линейные смещения в пределах 0,03–0,4 мм, а углы поворота - 0,02–0,04 град. У остальных зеркал линейные и угловые смещения на один-два порядка меньше.

В Таблице 1 приведены параметры изображения точечного источника в центре плазменного шнура, вычисленные для исходного состояния системы сбора света и для состояния с тепловыми деформациями первого зеркала. Среднеквадратичный и геометрический радиусы характеризуют размытие изображения, а вместе со смещением центра – и пространственное разрешение диагностики. Доля дошедших до плоскости изображения лучей характеризует чувствительность системы. Радиусы и смещение центра вычисляли в последовательном режиме программы Zemax, а долю дошедших лучей – в непоследовательном. Расчёты показали, что при тепловых деформациях проявляется только смещение центра в допустимых пределах.

Также были сделаны оценки деформаций, приводящих к заметному искажению светового сигнала. Рассматривались линейные смещения вдоль координатных осей до 100 мм и повороты на углы до 2,5 градусов. Установлено, что смещение вдоль оси OZ и вращение вокруг неё не влияют на изображение, а смещения вдоль OX и OY влияют только на долю дошедших лучей (Оси OX и OY лежат на поверхности зеркала, ось OZ перпендикулярна к ней). Вращение вокруг OX и OY приводит к увеличению радиусов в 3–5 раз, смещению центра до 20 мм. Существенно, что уже при поворотах до 1,5 градусов начинается резкое падение доли дошедших лучей.

Выводы. Построена в программе Zemax модель оптической схемы, позволяющая оценить влияние окружающих условий на характеристики диагностики Активная спектроскопия ИТЭР. Проанализировано влияние деформаций первого зеркала на параметры изображения, определяющие пространственное разрешение и чувствительность диагностики. Сделаны оценки влияния тепловых деформаций в рабочем режиме установки. Сделаны оценки предельно допустимых деформаций, выше которых диагностика неработоспособна.

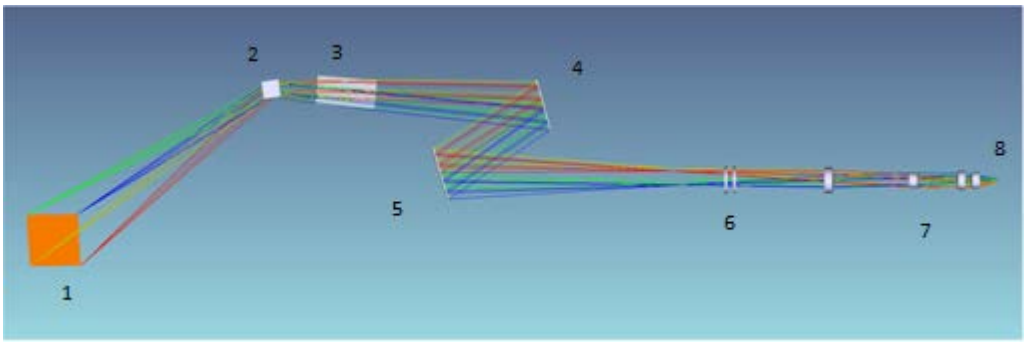


Рис. 6. Оптическая модель верхней системы сбора света 1 – объект-диагностический пучок, 2–5 – внутривакуумные зеркала, 6 – вакуумное окно, 7 – линзовая система, 8 – плоскость изображения плазменного шнура

Таблица 1

Характеристики изображения точечного источника в исходном состоянии оптической системы и в рабочем режиме с тепловыми деформациями зеркал

Характеристики изображения	Исходное состояние	Состояние с тепловыми деформациями
Среднеквадратичный радиус, мкм	125	120
Геометрический радиус, мкм	456	442
Смещение, мкм	0	230
Доля дошедших лучей	0,49	0,49

Литература

1. *Gorini G., Sindoni E.* Diagnostics for Experimental Thermonuclear Fusion Reactors. NewYork: PlenumPress, 1996.
2. *Fonck R.J., Darrow D.S., Jaehnig K.P.* Determination of plasma-ion velocity distribution via charge-exchange recombination spectroscopy// Physical Review. Vol. 29. № 6. June 1984.
3. *Зиновьев А.Н., Афросимов В.В.* Корпускулярно-спектроскопическая диагностика высокотемпературной плазмы. Диагностика плазмы под ред. Пергамента М.И. М.: Энергоатомиздат, 1990. Вып. 7. С. 56–111.
4. *Isler R.C.* An overview of charge-exchange spectroscopy as a plasma diagnostic// Plasma Phys. Control. Fusion, 36 (1994).
5. *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.

УДК 621.039.634

Осуществление контроля за уровнем бериллиевых загрязнений при изготовлении малых макетов панелей первой стенки ИТЭР

Д.А. Глазунов, А.А. Герваш, В.В. Рузанов

Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова

Первым этапом на пути серийного изготовления высоконагруженных панелей первой стенки ИТЭР (Рис.1а) является изготовление и испытание квалификационного прототипа (КП) (Рис.1б) [1]. Основная цель на этом этапе продемонстрировать работоспособность припаянной бериллиевой облицовки в условиях тепловой нагрузки, эквивалентной тепловой нагрузке в ИТЭРе.

Во время тепловых испытаний КП бронзовый слой между каналом водяного охлаждения и бериллиевой облицовкой был деформирован вследствие нарушения технологического процесса и уменьшения механических свойств бронзы, однако, этот факт запустил процесс более детального исследования конструкции и, в результате, проведённые расчёты показали слабые места существующей конструкции и выявили области зарождения пластических деформаций (Рис.2). По результатам расчётов была проведена работа по оптимизации сечения канала водяного охлаждения и рассмотрен ряд вариантов сечений (Рис.3). В итоге было выбрано сечение №3 как оптимальное в плане запаса прочности и технологической реализуемости, что позволило утвердить предложенный вариант канала.

Ещё одна проблема, выявленная в процессе сварки КП – деформации элементов конструкции под действием напряжений от лазерных сварных швов, выполненных на различных этапах технологического процесса. Указанные деформации проявили себя на этапе сборки КП, так как существенно усложнили данную операцию. Полную картину возникновения деформаций удалось выявить благодаря комплексному контролю геометрии изделий на различных этапах технологического процесса. В итоге, расположение сварных швов было изменено, а их протяжённость и количество уменьшены. Также были внесены изменения в последовательность операций сварки и промежуточной механической обработки.

Сложности, возникшие при изготовлении и испытании КП привели к выводу, что такую объёмную задачу необходимо разбить на части и для достижения основной цели – демонстрации

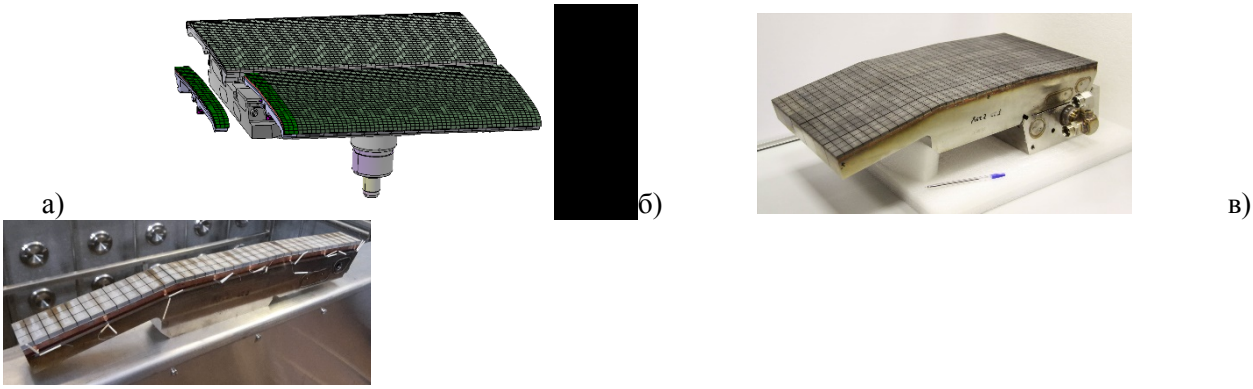
работоспособности решено было изготовить упрощённые макеты, которые представляют собой отдельные тепловоспринимающие элементы, из которых состоит как КП, так и полноразмерная панель первой стенки. Эти элементы, собранные вместе на панели напоминают собой пальцы рук, поэтому их называют пальцами (fingers). При этом, т.к. панель состоит из набора пальцев, работоспособность отдельно взятых пальцев будет, с определённым допущением, демонстрировать способность всей панели выдержать проектные тепловые нагрузки. С этой целью было изготовлено восемь пальцев (Рис.1в) и четыре из них подвергли тепловым испытаниям.

Одна из самых сложных и ответственных операций технологического процесса – это вакуумная пайка. Паяное соединение получается не ремонтопригодным. Единственный доступный на данный момент вариант ремонта – это отрезка всей бериллиевой облицовки вместе с биметаллической крышкой, и последующая приварка новой крышки. Поэтому, очень важно повысить до максимальных значений выход годной продукции, то есть сделать пайку практически бездефектной. В процессе изготовления квалификационных пальцев был выполнен анализ возможных причин образования дефектов. Выполнен контроль формы сопрягающихся при пайке поверхностей и определены критические значения отклонения от плоскостности. Определено оптимальное значение усилия прижима бериллиевых плиток и наиболее эффективная конфигурация фиксирующей оснастки.

Для проведения тепловых испытаний квалификационные пальцы с припаянной бериллиевой облицовкой помещаются в вакуумную установку Цефей-М с электронно-лучевой пушкой. Тепловые испытания представляют собой циклическое нагружение поверхности пальца, облицованной бериллием, в течение 15 секунд пучком электронов, создающим тепловой поток. Между импульсами 15 секунд пауза. Через палец циркулирует вода с входной температурой 70 ^{o}C, давлением 2 МПа и скоростью 2 м/с. Программа квалификационных испытаний включает в себя 7500 циклов при нагрузке 4,7 МВт/м^2 и 1500 циклов при нагрузке 5,9 МВт/м^2.

Все четыре пальца, установленные на испытательный стенд, успешно прошли тепловые испытания. Критерием успешности является отсутствие перегревающихся областей, сохранение неизменной средней температуры поверхности в течение испытательной компании, а также сохранение соединения облицовки с подложкой. Что всё вместе означает сохранение теплового контакта, а значит и способности эффективно снимать падающее на поверхность тепло.

Таким образом, продемонстрирована работоспособность паяной защитной облицовки, а значит и выполнена основная задача квалификационной программы.



а) б) в)

Рис. 1. а) 3D модель высоконагруженной панели первой стенки ИТЭР, размером 1 × 1,3 м, б) фотография КП в сборе, размером 300 × 600 мм, в) фотография пальца, размером 50 × 600 мм

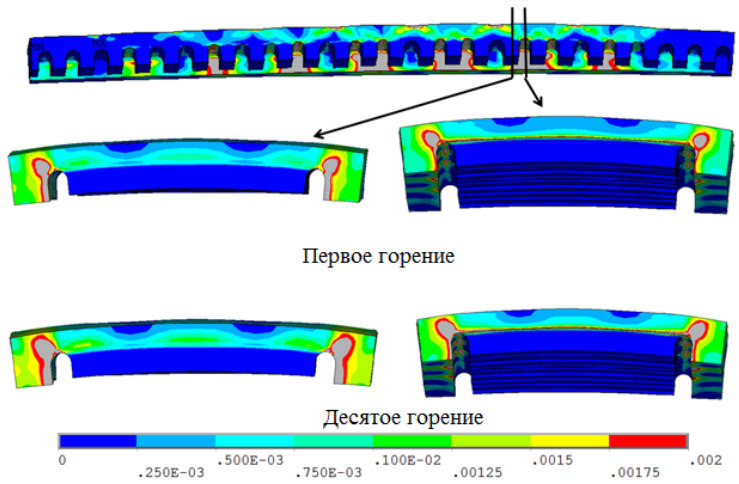


Рис. 2. Эквивалентная пластическая деформация в бронзовом слое пальцев ППС

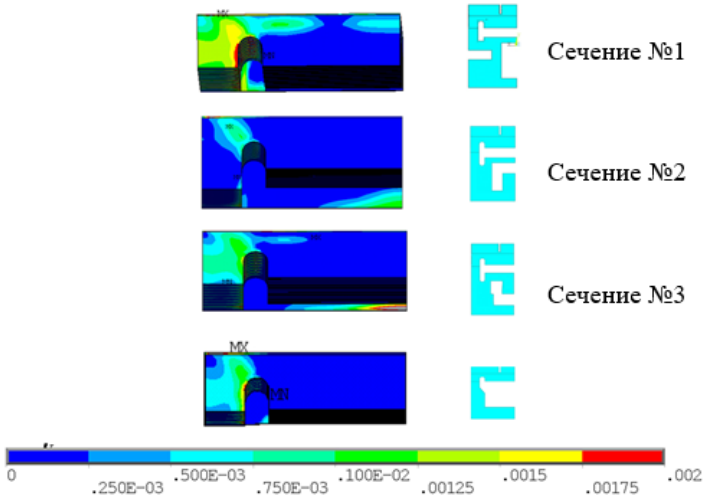


Рис. 3. Эквивалентная пластическая деформация для нескольких вариантов сечения ГВТ кананала пальцев ППС

Литература

1. *Глазунов Д.А., Герваш А.А., Мазуль И.В.* Изготовление квалификационного прототипа панели первой стенки термоядерного реактора ИТЭР // Труды 57-й научной конференции «Проблемы современной физики». 2014. Т. 78. С. 169.

УДК 533.924

Применение компактного датчика давления на основе пьезокерамики для измерения давления торможения потока плазмы на установке КСПУ-Т

***С.Д. Лиджигоряев*[1,2], *Д.В. Коваленко*[1]**

[1] Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований
[2]Московский физико-технический институт (государственный университет)

Известно, что в ИТЭР, во время переходных плазменных процессов, таких как ЭЛМ-события и срывы разряда, на защитные покрытия первой стенки и дивертора будут воздействовать мощные потоки плазмы, под действием которых будет происходить эрозия материалов покрытий [1]. Для определения времени жизни защитных покрытий в условиях ИТЭР необходимо иметь надёжные данные о скорости их эрозии под действием таких потоков. Получить такие данные на

существующих токамаках невозможно из-за недостаточной мощности этих токамаков, в связи с чем исследования взаимодействия мощных плазменных потоков с материалами защитных покрытий ИТЭР проводятся на установках других типов, в частности на плазменных ускорителях [2]. Одним из таких ускорителей является квазистационарный сильноточный плазменный ускоритель КСПУ-Т, который способен генерировать потоки плазмы с энергосодержанием до 200 кДж и длительностью до 1,0 мс [3].

Важным параметром, который может существенно влиять на эрозию материала под действием потока плазмы, является давление, оказываемое на поверхность облучаемой мишени потоком плазмы (давление торможения). До настоящего времени для измерения давления торможения на установке КСПУ-Т использовался датчик давления, представляющий собой два стержня диаметром 8 мм, между которыми располагался чувствительный элемент – диск из пьезокерамики ЦТС-19 (цирконат титанат свинца), обе поверхности которого покрыты тонким слоем серебра. Датчик устанавливался в вакуумную камеру КСПУ-Т таким образом, что его ось совпадала с осью плазменного потока, а торец одного из стержней (переднего) был направлен навстречу потоку плазмы. Длина стрежней выбиралась такой, чтобы время прохождения звукового сигнала по ним было больше длительности тока разряда ускорителя, что позволяло избавиться от электрических помех в регистрирующей цепи, связанных с коммутацией тока. На сегодняшний день характерная длительность разрядного тока КСПУ-Т может достигать 1 мс. Это означает, что длины стержней должны составлять 6 м и 3 м, для переднего и заднего стержней соответственно. Применение такого датчика в экспериментах оказывается затруднительным, в связи с чем, для измерения давления торможения было предложено использовать датчик давления другого типа, имеющий существенно меньший размер (компактный датчик давления).

Конструкция компактного датчика давления представлена на Рис.1. Чувствительный элемент датчика 2 (аналогично описанному выше датчику — диск из пьезокерамики ЦТС-19 с посеребренными поверхностями диаметром 5 мм и толщиной 1 мм), расположен на поверхности металлического (латунного) стержня 3. Стержень имеет специальную форму для снижения влияния отраженной от заднего конца стержня звуковой волны на измеряемый сигнал. Одна сторона диска находится в электрическом контакте со стержнем, а другая соединена медным проводником с металлическим корпусом 5, к которому припаяна оплетка сигнального кабеля. Жила кабеля припаяна к выводу 6 (заднему концу латунного стержня). Стержень 3 изолирован от корпуса 5 слоем герметика 4. Внешняя поверхность чувствительного элемента закрыта от непосредственного воздействия защитным слоем эпоксидной смолы 1 толщиной 1 мм. Датчик помещен в пластиковый корпус 7. Общая длина датчика в таком исполнении не превышает 40 мм.

В данной работе исследовалась возможность использования описанного компактного датчика давления для измерения давления торможения плазменного потока КСПУ-Т на твердотельной преграде. Была выполнена калибровка датчика и разработано устройство для его установки в вакуумную камеру КСПУ-Т. Проведены первые эксперименты по использованию датчика, в которых напряжение зарядки конденсаторной батареи ускорителя составляло U = 1,5 кВ, а длительность импульса разрядного тока – $t_{имп}$ = 0,35 мс. Показано, что коммутация тока ускорителя не оказывает существенного влияния на измеряемый сигнал. Установлено, что сигнал с датчика давления коррелирует с импульсом излучения, возникающего при взаимодействии плазменного потока с поверхностью мишени. Излучение регистрировалось через отверстие в мишени в направлении, перпендикулярном ее поверхности. Проведены оценки влияния нагрева чувствительного элемента при воздействии потока плазмы на результаты измерений (материал ЦТС-19 является пироэлектриком). Показано, что нагрев за счет теплопроводности не оказывает влияния на измеряемый сигнал.

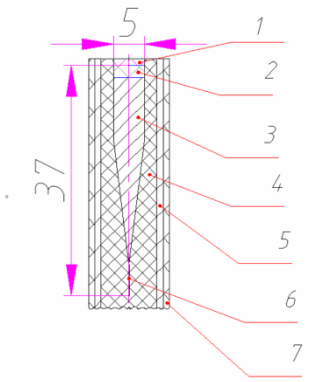


Рис. 1. Устройство компактного датчика давления

Литература

1. ITER Physics Basis. Nuclear Fusion. 1999. V. 39. P. 2137.
2. *Zhitlukhin A., Klimov N., Landman I.,* [*et al.*] // J. Nucl. Mater. 2007. P. 363–365.
3. *Klimov N.S., Poskakalov A.V., Kovalenko D.V.* [*et al.*]. *PFMC-16, Neuss/Düsseldorf, Germany.*

УДК 533.9.082

Моделирование спектров быстрых частиц для тангенциального спектрометра ИТЭР

***Т.М. Кормилицын*[1], *Ю.А. Кащук*[2], *Д.В. Портнов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

Исследование поведения быстрых ионов плазмы на современных термоядерных установках с магнитным удержанием представляет в настоящее время большой интерес. Появление в плазме популяции надтепловых ионов с анизотропной в пространстве скоростей функцией распределения является результатом термоядерных реакций вкупе с методами дополнительного нагрева плазмы, такими как инжекция нейтралов, ИЦР и т. д. Измерения энергетических спектров атомов перезарядки и нейтронов, произведенные диагностикой с тангенциальными линиями обзора, в комбинации с измерениями диагностики с радиальными линиями обзора внесут вклад в процедуру восстановления функции распределения быстрых ионов. Данные измерения также позволят оценить влияние нестабильностей плазмы, приводящих к перераспределению плотности быстрых ионов, а также оценить влияние этих нестабильностей на нагрев плазмы.

В ходе исследования разработан метод расчёта вклада надтепловой популяции ионов и полученые расчётные спектры наблюдаемых частиц (атомов перезарядки для гелий-водородной плазмы и нейтронов для дейтерий-тритиевой плазмы), позволяющие получать информацию об анизотропии функции распределения быстрых ионов. Метод основывается на прямом расчёте скорости реакции с развернутым моделированием кинематики реакций слияния [1]. Использовано численное представление функции распределения быстрых ионов, полученное путем численного решения уравнения Фоккера–Планка в программном обеспечении ASTRA [2].

Показано значительное влияние надтепловой части популяции быстрых ионов на наблюдаемый энергетический спектр частиц, покидающих плазму, выражающееся в уширении высокоэнергетической части нейтронного спектра на 1,5 МэВ, а также в многократном росте высокоэнергетической (более 1 МэВ) части спектра атомов перезарядки (рис. 1).

Результаты моделирования показывают, что тангенциальный спектрометр позволяет получить информацию об анизотропии функции распределения быстрых ионов в комбинации с радиальными измерениями анализатора нейтральных частиц (АНЧ) ИТЭР. Подтверждением этой гипотезы является рис. 1, на котором представлено сравнение энергетических спектров для смоделированных линий обзора ТС ИТЭР, линии обзора АНЧ ИТЭР и гипотетических линий обзора ТС ИТЭР, ориентированных в противоположном направлении. Для линий обзора, чей угол пересечения магнитных поверхностей близок к питч-углу большей части популяции быстрых ионов, спектр имеет повышенную интенсивность. Спектр для гипотетических линий обзора ТС

ИТЭР, смотрящих в противоположном направлении, менее интенсивен, чем спектр для линии обзора АНЧ ИТЭР; это связано с геометрическими параметрами коллиматоров данных диагностик: ТС ИТЭР имеет значительно более узкий коллиматор, чем АНЧ ИТЭР.

На рис. 2 представлено сравнение коллимированных энергетических спектров нейтронов до и после модельного перераспределения ионов, характеризующегося падением плотности ионов $f_{fast}(r,v,\mu) = f_{fast}(½\, r_{max},v,\mu)$, в центральной зоне $r \in [0;½\, r_{max}]$. S_{DTth} – энергетический спектр нейтронов, рожденных во взаимодействии тепловых дейтерия и трития, S_{tot} pre-ST и after-ST – полные коллимированные энергетические спектры нейтронов до и после перераспределения соответственно, S_{DbTth} pre-ST и S_{DbTth} after ST – энергетические спектры beam-thermal нейтронов до и после перераспределения ионов. Для диапазона энергий E > 16 МэВ модель позволяет говорить о возможности спектрометра детектировать перераспределение быстрых ионов, вызванное нестабильностями плазмы.

Результаты моделирования показывают серьезный вклад надтепловой популяции ионов в энергетический спектр нейтронов даже при номинальной плотности $\langle n \rangle \sim 10^{20}$ м$^{-3}$. Важно отметить, что популяция надтеплового дейтерия имеет зависимость $n_{Dfast} \sim P_{NBI}T_e^{3/2}/n_e$, а, следовательно, $S_{DbTth} \sim P_{NBI}T_e^{3/2}n_T/n_e$, и не зависит от плотности плазмы напрямую в отличие от максвелловской части, $S_{DTth} \sim n^2$. Следовательно, для фазы работы установки, характеризующейся низкой плотностью точность оценки центральной ионной температуры может значительно снизиться (T_{iTNS} – центральная ионная температура, оцененная по энергетическому диапазону спектра нейтронов [14,5; 15] МэВ, отмеченному зеленым на рис. 3).

а *б*

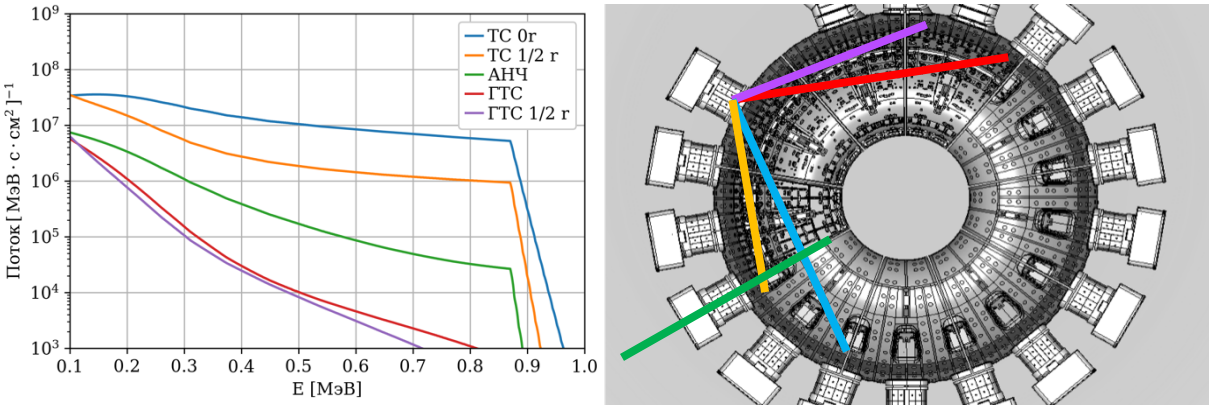


Рис. 1. Энергетические спектры атомов перезарядки для реалистичных линий наблюдения ТС, гипотетических линий наблюдения ТС (ГТС) и АНЧ ИТЭР (*а*) и иллюстрация линий наблюдения, для которых был выполнен расчёт (*б*)

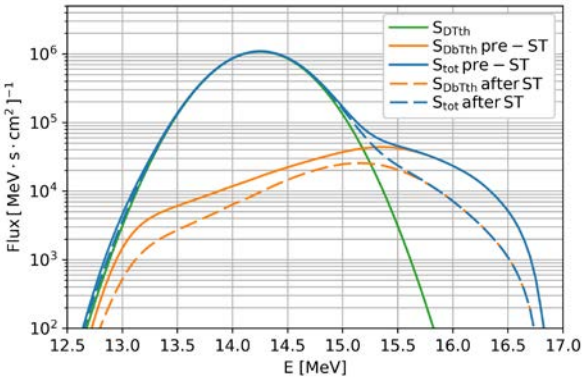


Рис. 2. Сравнение энергетических спектров коллимированных нейтронов до и после срыва (pre-ST, after ST)

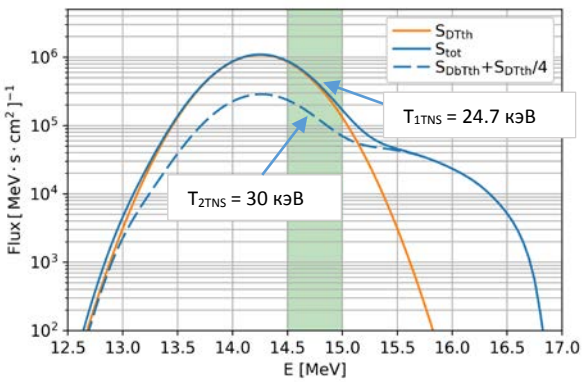


Рис. 3. Влияние S_{DbTth} – «теплового» спектра на оценку центральной температуры ионов, $T_{iTNS} = (dlnF/dE)^{-1}$

Работа выполнена в рамках государственного контракта от 19 апреля 2018 г. Н.4а.241.19.18.1027 «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2018 году».

Литература

1. *Heidbrink W.W.* Energy spectra from ‘beam-target’ nuclear reactions in magnetic fusion devices // Nucl. Inst. Methods Phys. Res. A. 1985. V. 236. № 2. P. 380–384.
2. *Polevoi A., Shirai H., Takizuka T.* Benchmarking of the NBI block in ASTRA code versus the FMC calculations. JAERI Data/Code 97-014, 1997.

Панель первой стенки модуля бланкета ИТЭР с механическим креплением энергонапряженных компонентов

***С.Н. Томилов*[1], *М.Н. Свириденко*[1], *А.Ю. Лешуков*[1], *А.А. Герваш*[2], *Е.В. Окунева*[2], *И.В. Мазуль*[2], *В.М. Сафронов*[3]**

[1]Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н.А. Доллежаля
[2]Научно-исследовательский институт электрофизической аппаратуры им. Д.В. Ефремова
[3]Учреждение Росатома «Проектный центр ИТЭР»

В рамках соглашения о поставке между МО «ИТЭР» и российскими домашними агентствами АО «НИКИЭТ» и АО «НИИЭФА» необходимо изготовить полномасштабный квалификационный макет панели первой стенки (панели ПС) [1]. Конструкция полномасштабного макета разработана на основе панели ПС № 14 типа А и включает в себя следующие элементы: несущая конструкция первой стенки (НКПС), энергонапряженные компоненты (пальцы ПС) и защитный тепловой экран (ЗТЭ), предназначенный для защиты сварных швов пальцев ПС/НКПС от теплового излучения плазмы.

В 2017 году для повышения ремонтопригодности и обеспечения возможности неразрушающего контроля элементов панели ПС на финальном этапе сборки в конструкцию полномасштабного макета внесены изменения, в том числе заменено сварное крепление пальцев ПС к НКПС на механическое. Поскольку механическое крепление располагается под пальцами ПС, оно не требует защиты от теплового излучения плазмы, что дает возможность исключить из конструкции ЗТЭ и упростить конфигурацию охлаждающего контура НКПС; тем не менее, перед принятием окончательного решения было необходимо оценить тепловые нагрузки в центральной части НКПС при отсутствии ЗТЭ.

Специалисты АО «НИКИЭТ» провели параметрический расчет варианта конструкции панели ПС с механическим креплением пальцев с целью изучения влияния глубины паза в центральной части панели ПС на напряженно-деформированное состояние, обусловленное действием теплового излучения плазмы.

Данная работа обобщает описание модифицированной конструкции панели ПС с механическим креплением пальцев ПС, а также результаты теплового расчета и анализа НДС конструкции. Проведенные расчеты и оценки критериев прочности подтвердили работоспособность конструкции панели ПС без ЗТЭ.

УДК 533.9.082

Методика калибровки спектрометра, разработанного для диагностической системы «Активная спектроскопия» ИТЭР, по длинам волн с использованием эталона Фабри–Перо

***А.Ю. Шабашов*[1], *С.В. Серов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований

В диагностике «Активная спектроскопия» ИТЭР проводится анализ профилей и сдвигов спектральных линий водородоподобных ионов с целью получения сведений о лёгких примесях, содержащихся в высокотемпературной плазме. В рамках работы над реализацией этой диагностики был разработан трёхдиапазонный спектрометр-полихроматор высокого разрешения [1]. Для измерения скорости вращения плазмы по допплеровскому сдвигу активной линии излучения

требуется точная калибровка по длинам волн. В статье [2] была предложена методика, обеспечивающая высокую точность калибровки в необходимом спектральном диапазоне.

Основной идеей данной методики является одновременное использование спектров излучения эталона Фабри-Перо и газоразрядной лампы (в данном случае неоновой), в спектре излучения которой присутствуют эталонные линии (рис. 1). Также зависимость длины волны от положения в пикселях полагается многочленом третьей степени:

$$\lambda = ax^3 + bx^2 + cx + d\ .$$

Располагая данными о положениях выбранных линий газоразрядной лампы и соответствующих им длинам волн, можно провести такое же соответствие для пиков спектра эталона Фабри–Перо. Так как пики равномерно полностью заполняют весь исследуемый диапазон, то проведённая калибровка обеспечивает высокую точность во всём этом диапазоне.

Для оценки точности были сравнены длины волн линий, полученные с помощью калибровки, с длинами волн этих же линий из базы данных [3]. Результат такого сравнения для всех трёх каналов спектрометра показан на рис. 2. Здесь максимальное отклонение составляет 0,006 нм, что можно принять за точность калибровки.

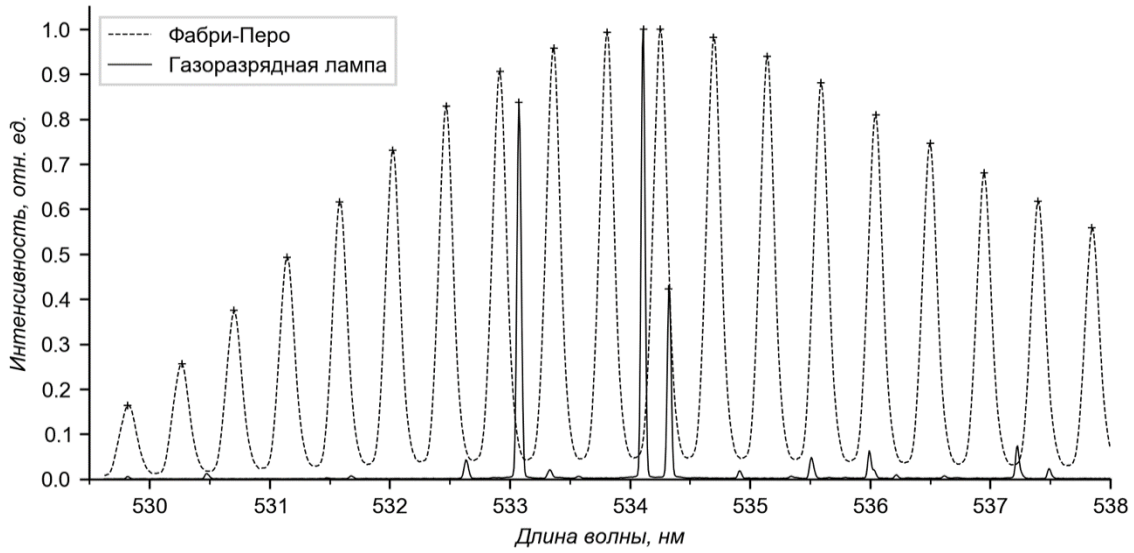


Рис. 10. Спектры эталона Фабри–Перо и газоразрядной неоновой лампы, наблюдаемые в одном из каналов спектрометра (крестиками отмечены пики, используемые в калибровке)

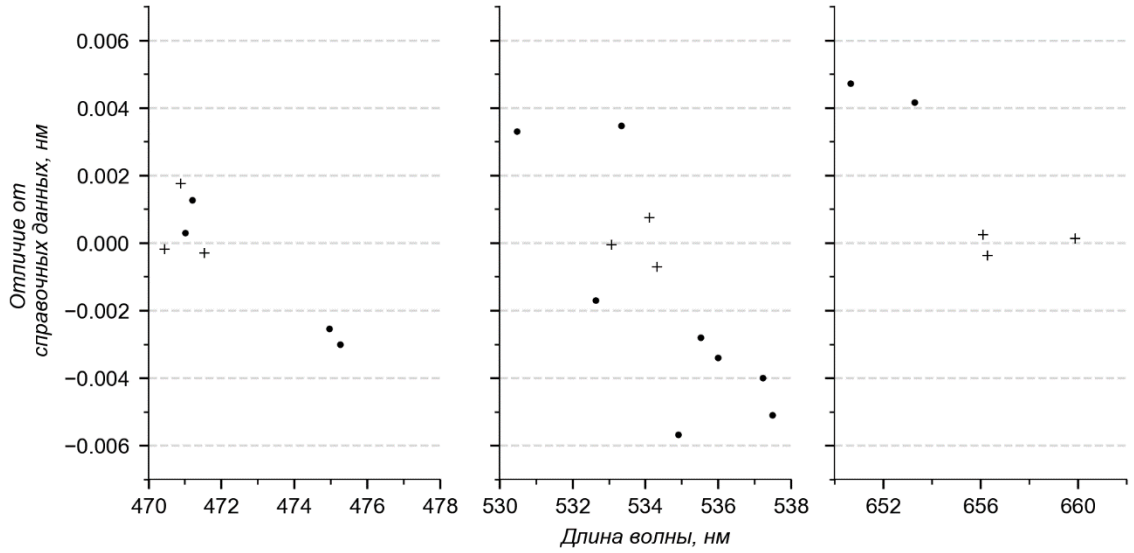


Рис. 11. Отличие от справочных данных (крестиками показаны линии, использованные для калибровки, кружками – остальные наблюдаемые линии)

Литература

1. *Тугаринов С.Н.* [*и др*] // Приборы и техника эксперимента. 2016. № 1. С. 102–107.
2. *Delabie E.*[*et al.*] // In situ wavelength calibration of the edge CXS spectrometers on JET. Review of Scientific Instruments. 2016. 87. 11E525.
3. Kramida A., Ralchenko Yu., Reader J., and NIST ASD Team // NIST Atomic Spectra Database. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

СЕКЦИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

Председатель: В.И. Манько (д.ф.-м.н., профессор)

Зам. председателя: С.Н. Филиппов (к.ф-м.н., доцент)

Секретарь: С.В. Винцкевич

Секретарь: И.М. Позняк

Дата: 20.11.2018

Время: 11:00-14:00

Место: Москва, Климентовский пер., д. 1, стр. 1

УДК 530.145

Количественное описание корреляций, сопровождающих немарковскую квантовую динамику при смешивании марковских процессов

А.Н. Глинов[1]***, С.Н. Филиппов***[1,2,3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН
[3]Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

В последние годы в области исследований немарковской динамики квантовых систем неоднократно был отмечен эффект появления немарковости эволюции (т. е. нарушения критерия марковости, основанного на монотонности различимости состояний) в том случае, когда процесс является выпуклой комбинацией двух марковских отображений [1–4]:

$$\Phi_t = q_1\Phi_t^{(1)} + q_2\Phi_t^{(2)};\ \ q_1 + q_2 = 1;\ \ q_1, q_2 \geq 0\,. \qquad (1)$$

Бройер, Амато и Ваччини в работе [5] разработали микроскопическую модель немарковости, реализуемой при смешивании двух марковских процессов. Эта модель основана на введении дополнительного кубита (обозначаемого как A), который представляет собой классическую степень свободы, отвечающую за выбор одного из двух квантовых каналов (с весами q_1 и q_2 соответственно). Его матрица плотности со временем не меняется и имеет вид

$$\rho_A = \begin{pmatrix} q_1 & 0 \\ 0 & q_2 \end{pmatrix}. \qquad (2)$$

Отсюда можно получить обобщение процесса Φ_t как семейства отображений из множества операторов плотности системы S в операторы плотности S+A:

$$\Lambda_t[\rho_s] = q_1\Phi_t^1[\rho_S]\otimes\Pi_1 + q_2\Phi_t^2[\rho_S]\otimes\Pi_2\,, \qquad (3)$$

где Π_1, Π_2 – проекторы на собственные (базисные) состояния ρ_A. Взятие частичного следа по A в формуле (3) даёт $\Phi_t[\rho_S]$. При этом существенно то, что Λ_t – марковский процесс при условии марковости Φ_t^1 и Φ_t^2, поскольку возникновение эффектов памяти при рассмотрении S обусловлено наличием обратного потока информации из A в S (хотя для объединённой системы S+A такое явление по отношению к реальным физическим окружениям отсутствует).

Цель настоящей работы – количественно описать корреляции между системой и вспомогательным кубитом. Покажем, что в качестве характеристики корреляций может выступать параметр доступа к вспомогательному кубиту p_*, при котором осуществляется переход от марковского режима для S+A к немарковскому. Для этого применим к вспомогательному кубиту A деполяризующий канал $D_p[X] = pX + (1-p)\mathrm{tr}[X]\frac{1}{2}I$, тогда

$$D_p \circ \Lambda_t[\rho_S] = p\Lambda_t[\rho_S] + (1-p)\Phi_t[\rho_S] \otimes \frac{I}{2}, \quad (4)$$

где $0 \le p \le 1$ – степень деполяризации. Отметим, что деполяризация в данном случае может (по крайней мере частично) разрушать корреляции между S и A.

В статье [5] в качестве примера Φ_t была рассмотрена смесь двух процессов затухания фазы кубита (без вращения и с вращением вокруг оси *z* шара Блоха). Для этого процесса недиагональные элементы матрицы плотности кубита умножаются на выражение $q_1\mu_1(t) + q_2\mu_2(t)$, где $\mu_k = \exp[-(\gamma_k + i\lambda_k)t]$, $k = 1,2$. Пусть Δ – расстояние между состояниями, измеряемое в следовой метрике, тогда степень немарковости определяется формулой $N(\Phi) = \max\limits_{\rho_S^{1,2}} \int\limits_{\sigma>0} dt\, \sigma(t)$, где $\sigma(t) = \frac{d}{dt}\Delta(\Phi_t[\rho_S^1], \Phi_t[\rho_S^2])$. Оптимальные состояния для рассматриваемого примера: $\rho_S^1 = \frac{I + \sigma_y}{2}$, $\rho_S^2 = \frac{I - \sigma_y}{2}$. При одинаковых скоростях затухания $\gamma_k = \gamma$ и равенстве нулю одного из параметров λ_k расстояние между состояниями ρ_S^1 и ρ_S^2 возрастает в определённые промежутки времени, что и указывает на немарковость эволюции.

Применяя отображение D_p, получаем зависимость Δ и от p. После нахождения значения p', при котором меняется характер монотонности Δ в процессе с фиксированными весами смеси, максимизируем его по всем q_1 (максимум достигается при $q_1 = q_2$). Обозначим это значение p_*, оно представимо в виде

$$p_*^2 = \frac{\sqrt{\xi^2+1} - \xi}{\sqrt{\xi^2+1} + \xi}, \quad \xi = \frac{2\gamma}{\lambda}. \quad (5)$$

Выбирая произвольное чистое состояние в экваториальной плоскости сферы Блоха (например, ρ_S^1) и вычисляя максимум информационной корреляции между системой и вспомогательным кубитом: $I(S;A) = H(\rho_S) + H(\rho_A) - H(\rho_{S+A})$, мы находим зависимость

$$I(S;A)_{\max}(\xi) = 1 - h(\exp[-\frac{\pi\xi}{4}]\cosh[\frac{\pi\xi}{4}]), \quad (6)$$

где $h(x) = -(x\log_2 x + (1-x)\log_2(1-x))$ – бинарная энтропия Шеннона. Ввиду взаимно однозначного соответствия между $I(S;A)_{\max}$ и p_* (рис. 1) и монотонности функции (6) делаем ключевой вывод о том, что введённая величина p_* отражает максимально возможные в процессе корреляции между *S* и A, а значит, служит как мерой корреляций систем (в приведённом выше смысле), так и характеризует устойчивость модели немарковости Бройера, Амато и Ваччини по отношению к степени доступа к вспомогательному кубиту.

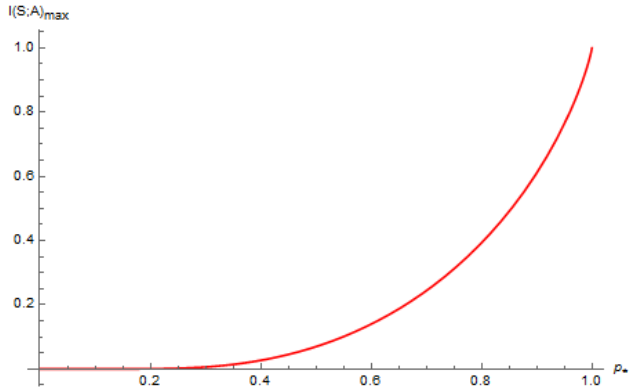


Рис. 1. График зависимости $I(S;A)_{max}$ от p_*

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда № 16-11-00084.

Литература

1. *Vacchini B.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2012. 45. 154007.
2. *Chruściński D., Wudarski F.A. //* Phys. Lett. A. 2013. 377. 1425.
3. *Megier N.* [*et al.*] // Sci. Rep. 2017. 7. 6379.
4. *Filippov S.N.* [*et al.*] // Phys. Rev. A. 2017. 96. 032111.
5. *Breuer H-P.* [*et al.*] // New J. Phys. 2018. 20. 043007.

УДК 530.145

Немарковская динамика и деформации квантовых марковских цепей

А.Е. Теретёнков

Математический институт им. В.А. Стеклова РАН
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

В работе излагается деформационный подход к описанию немарковской динамики, предложенный (на основе результатов [1]) в [2]. Для наглядности рассматривается наиболее простой случай: марковскому уравнению для матрицы плотности в $\mathbb{C}^2$ сопоставляется марковское уравнение для матрицы плотности в $\mathbb{C}^3$ такое, что после λ-скейлинга Ван Хова–Боголюбова для редуцированной матрицы плотности и перехода к пределу $\lambda \to 0$ восстанавливается исходное уравнение (утверждение 1). Такой подход обусловлен тем, что при нулевой температуре уравнение (1) позволяет описать точную динамику редуцированной матрицы плотности в модели спин-бозона в приближении вращающейся волны для лоренцевской спектральной плотности (утверждение 2). Описание такой точной динамики с помощью уравнений с генераторами Горини–Коссаковского-Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) базируется на методе псевдомод [1]. Однако в отличие от [1], где получались уравнения ГКСЛ для матриц плотности в бесконечномерном гильбертовом пространстве, мы рассматриваем куда более простое с вычислительной точки зрения уравнение (1).

Перейдём к явной математической формулировке основных результатов работы. Рассмотрим трехмерное гильбертово пространство $\mathbb{C}^3$ с базисом $|0\rangle,|1\rangle,|2\rangle$. Введём обозначения

$$D_{lk}(\rho) = |k\rangle\langle l|\rho|l\rangle\langle k| - \frac{1}{2}\rho|l\rangle\langle l| - \frac{1}{2}|l\rangle\langle l|\rho,$$

$$h_{kl}(\rho) = -i[|k\rangle\langle l| + |l\rangle\langle k|, \rho],$$

$$\rho_S = \rho_{11}|1\rangle\langle 1| + \rho_{10}|1\rangle\langle 0| + \rho_{01}|0\rangle\langle 1| + (1-\rho_{11})|0\rangle\langle 0|$$

для произвольной матрицы плотности ρ в $\mathbb{C}^3$.

Мы будем говорить, что квантовая марковская цепь с генератором $\gamma_0 n D_{01} + \dfrac{4g^2}{\gamma_0(n+1)} D_{20} + gh_{12}$ является *деформацией* марковской цепи с генератором $\gamma_0 n D_{01} + \gamma_0(n+1) D_{10}$. Такое определение обусловлено следующим утверждением:

Утверждение 1. Пусть $\rho(t,g,\gamma_0,n)$ – решение задачи Коши:

$$\frac{d}{dt}\rho(t,g,\gamma_0,n) = \gamma_0 n D_{01}(\rho(t,g,\gamma_0,n)) + \frac{4g^2}{\gamma_0(n+1)} D_{20}(\rho(t,g,\gamma_0,n)) + gh_{12}(\rho(t,g,\gamma_0,n)) \quad (1)$$

с начальным условием таким, что $\rho(0,g,\gamma_0,n)|2\rangle = 0$ и $\langle 2|\rho(0,g,\gamma_0,n) = 0$.

Тогда $\rho_M(t,\gamma_0,n) \equiv \lim\limits_{\lambda\to 0} \rho_S(t/\lambda^2, \lambda g, \lambda^2\gamma_0, n)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt}\rho_M(t,\gamma_0,n) = \gamma_0 n D_{01}(\rho_M(t,\gamma_0,n)) + \gamma_0(n+1) D_{10}(\rho_M(t,\gamma_0,n)). \quad (2)$$

Интерес к уравнению (1) связан со следующим утверждением:

Утверждение 2. Пусть $|\psi(t)\rangle \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathfrak{F}_b\left(L^2(\mathbb{R})\right)$ – решение уравнения Шрёдингера для модели спин-бозона в приближении вращающейся волны:

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H_{SB}|\psi(t)\rangle,\ H_{SB} = \varepsilon_1 |1\rangle\langle 1| \otimes I + \int dk\, \omega_k I \otimes b_k^\dagger b_k + \int dk (g_k^* |0\rangle\langle 1| \otimes b_k^\dagger + g_k |1\rangle\langle 0| \otimes b_k),$$

где $\mathfrak{F}_b\left(L^2(\mathbb{R})\right)$ – бозонное фоковское пространство и $\left[b_k, b_l^\dagger\right] = \delta_{kl}$, с начальным условием вида $|\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle_{\mathbb{C}^2} \otimes |1\rangle$. Кроме того, пусть $\int dk |g_k|^2 e^{-i\omega_k t} = g^2 e^{-\left(\frac{2g^2}{\gamma_0} + i\varepsilon_1\right)t}$.

Тогда $\mathrm{Tr}_{\mathfrak{F}_b\left(L^2(\mathbb{R})\right)} |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \rho_S\left(t, g, \gamma_0, 0\right)$, где $\rho\left(t, g, \gamma_0, 0\right)$ – решение уравнения (1) при $n = 0$, а ρ_S для произвольной матрицы плотности ρ в $\mathbb{C}^3$ было определено выше.

Отметим также, что в [2] уравнение (1) при нулевой температуре позволяет описать экспериментально наблюдаемые немарковские эффекты в комплексах Фенна–Мэтьюса–Ольсона.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-71-20154).

Литература

1. *Garraway B.M.* Nonperturbative decay of an atomic system in a cavity // Phys. Rev. A. 1997. V. 55, N 3. P. 2290.
2. *Теретёнков А.Е.* Метод псевдомод и вибронные немарковские эффекты в светособирающих комплексах // Труды МИАН (готовится к публикации).

УДК 530.145

Сравнение модели столкновений и предела низкой плотности для динамики открытых квантовых систем

Г.Н. Семин[1], ***С.Н. Филиппов***[1,2,3], ***А.Н. Печень***[3]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН
[3]Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Динамика внутренних степеней свободы квантовой системы, находящейся в свободном квантовом газе, была рассмотрена в пределе низкой плотности в работах [1, 2]. В этом переделе мастер-уравнение для редуцированной матрицы плотности квантовой системы имеет вид

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}_{LDL}(\rho), \quad \mathcal{L}_{LDL}(\rho) = -\frac{i}{\hbar}[H_S + H_{LS}, \rho] + \frac{\mathcal{D}_{LDL}(\rho)}{\hbar}, \tag{1}$$

где H_S – гамильтониан системы, который описывает ее внутренние степени свободы:

$$H_S = \sum_k \epsilon_k |k\rangle\langle k|, \tag{2}$$

гамильтониан H_{LS} определяет лэмбовский сдвиг:

$$H_{LS} = \frac{n}{2} \sum_{\epsilon_k = \epsilon_l} \int \mathrm{d}^3 p G(\vec{p}) \{T(k, \vec{p} \,|\, l, \vec{p}) + T^*(k, \vec{p} \,|\, l, \vec{p})\} |k\rangle\langle l|. \tag{3}$$

Здесь n – концентрация частиц газа, $G(\vec{p})$ – распределение частиц газа по импульсам, $T(k, \vec{p} \,|\, l, \vec{p})$ – элементы T-матрицы рассеяния одной частицы газа на системе. Диссипатор задается уравнением

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{LDL}(\rho) = \frac{2\pi n}{\hbar^3} \sum_\omega \int \mathrm{d}^3 p \int \mathrm{d}^3 q G(\vec{p}) \delta(E(\vec{q}) - E(\vec{p}) + \hbar\omega) \times \\ \times \left[T_\omega(\vec{q}, \vec{p}) \rho T_\omega^\dagger(\vec{q}, \vec{p}) - \tfrac{1}{2}\{\rho, T_\omega^\dagger(\vec{q}, \vec{p}) T_\omega(\vec{q}, \vec{p})\}\right], \end{aligned} \tag{4}$$

где $E(\vec{p})$ – закон дисперсии частиц газа, $\hbar\omega$ – энергия возбуждения внутренних степеней свободы, $T_\omega(\vec{q}, \vec{p})$ – оператор, выражающийся через T-матрицу следующим образом:

$$T_\omega = \sum_{\epsilon_k - \epsilon_l = \hbar\omega} T(k,\vec{q}\,|\,l,\vec{p})\,|\,k\rangle\langle l\,|\,. \tag{5}$$

Данная модель рассматривается в следующих пределах. Во-первых, концентрация частиц газа n стремится к нулю. При этом частицы газа сталкиваются с системой очень редко: вероятность одновременного столкновения двух и более частиц газа с системой пренебрежимо мала. Во-вторых, время прохождения длины свободного пробега t стремится к бесконечности. При этом должно соблюдаться условие $nt \to \text{const}$.

Поскольку в данной модели частицы газа взаимодействуют с рассматриваемой системой посредством столкновений, при этом столкновения рассматриваются как статистически независимые события, то рассматриваемая модель должна быть непосредственно связана с квантовой моделью столкновений [3, 4]. В настоящее время явно показанной связи между пределом низкой плотности и моделью столкновений не существует. В данном докладе мы исследуем связь между упомянутыми моделями на примере конкретной задачи и показываем их эквивалентность.

Рассмотрим задачу, где частицы газа и система обладают двумя внутренними степенями свободы, а потенциал взаимодействия между частицей газа и системой имеет вид обменного гамильтониана, активирующегося на расстояниях порядка d_0 между частицей газа и системой:

$$V(\vec{r}) = \hbar\gamma \exp(-\frac{r^2}{2d_0^2})F, \qquad F = \sum_{k\neq l} |k\rangle\langle l\,| \otimes |l\rangle\langle k\,|\,. \tag{6}$$

Считаем, что состояния системы вырождены ($\omega = 0$), в этом случае столкновения будут упругими. Внутреннее состояние каждой частицы газа есть $|0\rangle\langle 0\,|$, а начальное состояние системы $|1\rangle\langle 1|$. Для распределения частиц газа по импульсам $G(\vec{p})$ рассмотрим распределение Максвелла с температурой T. Тогда элементы T-матрицы в борновском приближении для импульсов одинаковой величины будут иметь вид

$$T(k,\vec{q}_i\,|\,l,\vec{p}_j) = \hbar\gamma d_0^3 \exp(-\frac{2p^2 d_0^2 \sin^2(\frac{\theta}{2})}{\hbar^2})F_{ki,lj}\,, \tag{7}$$

где θ – угол между импульсами $\vec{q}$ и $\vec{p}$. Диссипатор будет равен

$$\mathcal{D}_{LDL}(\rho) = \frac{64\pi^3\hbar n m\gamma d_0^6 (mkT)^2}{(2\pi mkT)^{3/2}(\hbar^2 + 8d_0^2 mkT)}(\sigma_-\rho\sigma_+ - \tfrac{1}{2}\{\rho,\sigma_+\sigma_-\})\,, \tag{8}$$

где $\sigma_- = |0\rangle\langle 1|$ и $\sigma_+ = |1\rangle\langle 0\,|$. В случае $mkTd_0^2 \gg \hbar^2$ диссипатор принимает вид

$$\mathcal{D}_{LDL}(\rho) = \frac{(2\pi)^{3/2}\hbar n m\gamma^2 d_0^4}{(mkT)^{1/2}}(\sigma_-\rho\sigma_+ - \tfrac{1}{2}\{\rho,\sigma_+\sigma_-\})\,. \tag{9}$$

В квантовой модели столкновений рассматривается гамильтониан вида

$$H_{int} = \hbar\gamma F\,, \tag{10}$$

действующий на систему и частицу газа, совершающую классическое движение в пространстве, в течение времени столкновения τ. Для рассматриваемого потенциала $\tau \sim \frac{d_0}{\langle v\rangle} = \sqrt{\frac{\pi m d_0^2}{8kT}}$. В промежутке между столкновениями система эволюционирует тривиальным образом, поэтому необходима перенормировка времени $t \to \frac{\tau}{t_{free}}t$, где $t_{free} = \frac{1}{\sigma n\langle v\rangle}$ – время свободного пробега, $\langle v\rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ – средняя скорость, $\sigma \sim d_0^2$ – эффективное сечение. В стробоскопическом пределе ($\gamma\tau \to 0, \gamma^2\tau \to \text{const}$) основное кинетическое уравнение имеет вид [5]:

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{\mathcal{D}_{CM}(\rho)}{\hbar} \tag{11}$$

с генератором

$$\mathcal{D}_{CM}(\rho)=\hbar\gamma^2\tau\frac{\tau}{t_{free}}(\sigma_-\rho\sigma_+-\tfrac{1}{2}\{\rho,\sigma_+\sigma_-\})=\sqrt{\frac{\pi}{8}}\frac{\hbar nm\gamma^2 d_0^4}{(mkT)^{1/2}}(\sigma_-\rho\sigma_+-\tfrac{1}{2}\{\rho,\sigma_+\sigma_-\})=\frac{1}{8\pi}\mathcal{D}_{LDL}. \quad (12)$$

Таким образом, при высокой температуре ($mkTd_0^2\gg\hbar^2$) диссипаторы в пределе низкой плотности и в модели столкновений совпадают с точностью до постоянного множителя.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда № 17-11-01388.

Литература

1. *Dümcke R.* The Low Density Limit for an *N*-Level System Interacting with a Free Bose or Fermi Gas // Commun. Math. Phys. 1985. V. 97. 331–359.
2. *Accardi L., Pechen A.N., Volovich I.V.* A stochastic golden rule and quantum Langevin equation for the low density limit // Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics. 2003. V. 6. N. 3. 431–453.
3. *Rau J.* Relaxation Phenomena in Spin and Harmonic Oscillator Systems // Physical Review. 1963. V. 129. N 4. 1880–1888.
4. *Ziman M., Štelmachovič P., Bužek V.* Description of quantum dynamics of open systems based on collision-like models // Open systems and information dynamics. 2005. V. 12. N 4. 81–91.
5. *Filippov S.N., Piilo J., Maniscalco S., Ziman M.* Divisibility of quantum dynamical maps and collision models // Physical Review A. 2017. V. 96. 032111.

УДК 535.14

Влияние свойств неклассического смешанного состояния накачки на свойства запутанности фотонов в процессе параметрической генерации

С.В. Винцкевич[1,3]***, С.Н. Филиппов***[1,2]

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

Нелинейные оптические процессы являются одними из ключевых в получении состояний фотонов со свойством квантовой запутанности [1]. Цель наших исследований – установить взаимосвязь между произвольной структурой смешанного состояния накачки и мерой квантовой запутанности подсистемы фотонов, получающихся в процессе оптической параметрической генерации. Исследования влияния некоторых смешанных состоянии накачки на параметр сжатия при генерации сжатых состояний представлены в работе [2].

В качестве меры запутанности мы используем Negativity (негативити), так как эта мера запутанности легко вычисляется и подходит для смешанных состояний. Мы используем параметрическое приближение адаптированное на случай полностью квантового описания оптической параметрической генерации [3, 4]. Также в работе представлен математически простой метод анализа взаимосвязи между структурой *P*-функции Глаубера–Сударшана для состояния накачки и свойств запутанности системы сигнального и холостого фотонов. Применяя наш метод мы установили эффект, напоминающий деструктивную интерференцию для меры запутанности.

С.В. Винцкевич благодарит Фонд теоретической физики и математики «Базис» за поддержку этой работы, грант «PhD Student» № 17-15 - 603-1.

Литература

1. *Pan J.-W., Chen Z.-B., Lu C.-Y., Weinfurter H., Zeilinger A., and Żukowski M.,* Multiphoton entanglement and interferometry // Rev. Mod. Phys. 2012. 84. 777.
2. *Hillery Mark, Yu Daoqi, and Bergou Janos* , Effect of the pump state on the behavior of the degenerate parametric amplifier // Phys. Rev. A 49, 1288.
3. *Drobný G., Jex I., and Bužek V.,* Mode entanglement in nondegenerate down-conversion with quantized pump // Phys. Rev. A. 1993. 48. 569.
4. *Tanaś R. and Gantsog Ts.,* Phase properties of fields generated in a multiphoton down-converter // Phys. Rev. A. 1992. 45. 5031.

УДК 535.14

Корреляционные свойства суперпозиций многофотонных поляризационных состояний

М.В. Федоров, С.В. Винцкевич, Д.А. Григорьев

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

Вид матрицы когерентности бифотонного кутрита известен, начиная с работы [1]. Однако в [2, 3] показано, что существует значительно более содержательная форма такой матрицы, однозначно выражающаяся через матрицу плотности рассматриваемого состояния. В дальнейшем данный подход применялся в [4, 5] для состояний большей размерности. К достоинствам данного подхода стоит также отнести значительное упрощение процедуры поиска редуцированных матриц плотности с произвольной степенью редукции. Этот подход лег в основу настоящей работы и был расширен на случай суперпозиции состояний с произвольным числом фотонов.

В данной работе теоретически и численно изучались корреляционные свойства суперпозиций многофотонных поляризационных состояний. Получен общий вид матрицы перехода, понижающей размерность задачи. Описан эффективный метод расчётов редуцированных матриц плотности и степени перепутывания для состояний с числом фотонов более тысячи. Использование альтернативной матрицы когерентности из [2, 3] обосновано, опираясь на связь с конкарренсом [6, 7] и степенью поляризации. В ходе исследования были найдены зависимости степени перепутывания и энтропии от числа фотонов, состава суперпозиции и разбиения на подсистемы. Изучено влияние отдельных слагаемых суперпозиции на свойства состояния как целого. Показано, что в случае суперпозиции состояний с заданным числом фотонов все зависимости строго симметричны, в то время как в остальных случаях данное свойство не наблюдается.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-02-00634 А.

Литература

1. *Klyshko D.M.* Polarization of light: fourth-order effects and polarization-squeezed states // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1997. 84.6: 1065–1079.
2. *Fedorov M.V.*, [*et al.*] Entanglement of biphoton states: qutrits and ququarts // New Journal of Physics. 2011. 13.8: 083004.
3. *Федоров М.В., Волков П.А., Михайлова Ю.М.* Кутриты и кукварты в спонтанном параметрическом рассеянии света, корреляции и перепутывание состояний // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. 142.7: 20–43.
4. *Fedorov M.V., Miklin N.I.* Schmidt modes and entanglement // Contemporary Physics 55.2 (2014): 94–109.
5. *Fedorov M.V., Miklin N.I.* Three-photon polarization ququarts: polarization, entanglement and Schmidt decompositions // Laser Physics. 2015. 25.3: 035204.
6. *Wootters William K.* Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits // Physical Review Letters. 1998. 80.10: 2245.
7. *Rungta Pranaw, Carlton M. Caves.* Concurrence-based entanglement measures for isotropic states // Physical Review A. 2003. 67.1: 012307.

Научное издание

Труды

61-й Всероссийской научной конференции МФТИ

19–25 ноября 2018 года

Фундаментальная и прикладная физика

Составители:
М.В. Милов, Е.Ю. Чиркина

Редакторы:
В.А. Дружинина, И.А. Волкова

Набор и вёрстка:
Н.А. Сидорец

Подписано в печать 03.12.2018. Фомат 60×84 1/8.
Усл. печ. л. 44,125. Тираж 50 экз. Заказ № 285.
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

Объявление о проведении конкурса молодых учителей физики «Профессиональное мастерство учителя физики» (далее – конкурс)

Конкурс организуется и проводится Фондом развития Физтех-школ (далее – Фонд) с использованием гранта Президента Российской Федерации на развитие гражданского общества, предоставленного Фондом президентских грантов, на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» (далее – МФТИ).

Принять участие в конкурсе могут педагогические работники (до 40 лет) организаций, осуществляющих образовательную деятельность, участвующие в реализации общеобразовательных программ в области физики, в том числе работающие по совместительству.

Этапы конкурса (информация представлена на сайте: *учителя-мастерство.рф*):

первый этап заочно в режиме онлайн в форме представления до 10 января 2019 г. своего «портфолио» и/или своих методик и разработок по обучению школьников решению экспериментальных задач по физике;

второй этап очно в форме семинара с 30 июня по 13 июля 2019 г. на базе МФТИ (141701 Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер. 9).

По итогам первого этапа конкурса не менее 100 участников будут приглашены для очного участия во второй этап конкурса с возмещением Фондом расходов за проживание, из них не менее 50 участников – также с возмещением Фондом расходов за проезд.

Во втором этапе конкурса может участвовать не более 2 участников от одного субъекта Российской Федерации.

Контактная информация: телефон +7 915-217-21-00, адрес электронной почты *master-teacher2018@mail.ru*.