Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

ТРУДЫ

66-й Всероссийской научной конференции МФТИ

1–6 апреля 2024 г.

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

Москва
ФИЗМАТКНИГА
2024

УДК 53
ББК 22.3
Т78

Т78 Труды 66-й Всероссийской научной конференции МФТИ, 1–6 апреля 2024 г. Фундаментальная и прикладная физика. — М: Физматкнига, 2024. — 538 с. ISBN 978-5-89155-410-8.

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

Все статьи в сборнике приведены в авторских редакциях. Ответственность за качество подготовки статей к публикации, а также за содержащиеся в них ошибки, опечатки и неточности полностью лежит на авторах.

ISBN 978-5-89155-410-8



© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ 22

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ 23

СЕКЦИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ 24

Анализ данных сцинтилляционного вето-детектора в эксперименте Short-Range Correlations на BM@N 2022 24
А. Г. Бочкова

Оптическая стабилизация волоконно-оптических усилителей мощности для протяженных линий связи 26
Е. Д. Бессонова, А. Ю. Игуменов, С. Н. Лукиных, О. Е. Наний, В. Н. Трещиков

Исследование реакции ^{11}B(p,α)αα при энергии протонов 0,15-2,2 МэВ 27
А. А. Шуклина, М. И. Бикчурина, Т. А. Быков, Д. А. Касатов, Е. О. Соколова, С. Ю. Таскаев

Генератор случайных чисел на основе шума биполярного транзистора 29
Д. А. Матюшин, А. М. Лобанов, Д. Р. Тихонов, Г. И. Лапушкин, В. Ю. Стожков

Автоматический анализ физических явлений на рефлектограммах многокилометровых оптоволоконных сетей 31
В. С. Вазюля, А. Ю. Игуменов, Е. В. Сметанина, Т. П. Шувайникова

Способ определения усредненных дебаевских параметров материалов в широких температурных интервалах 32
И. В. Голышев, М. А. Егиян, В. Е. Ивашев, Г. И. Лапушкин, В. Ю. Стожков

СЕКЦИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ 35

Взаимодействие топологических солитонов в скалярных теориях с полиномиальным самодействием 35
А. А. Мальнев, Т. В. Гани, П. А. Блинов

Диаграммная техника Келдыша в фазовом пространстве 37
А. Г. Михайленко, А. Г. Семенов

О значимости квантовых поправок в расширяющихся вселенных 38
Э. Т. Ахмедов, А. В. Анохин, К. А. Казарновский

Подавление космологической постоянной в нестационарном скалярном ковариантном состоянии 40
А. Б. Айнбунд

Вильсоновские сети в пространстве AdS и глобальные конформные блоки 41
К. Б. Алкалаев, А. О. Канода, В. С. Хитеев

Вычисление спиновой асимметрии в процессе рассеяния поляризованных дейтронов на углероде и кислороде 43
Г. А. Симонян

Эффективная гравитационная масса в пространстве де Ситтера 44
Д. И. Садеков

N=2 суперсимметричные модели высших спинов: проекторы на различные состояния гипермультиплета . 44
Е. И. Еремеев

Новые функции расщепления для неупругого темного тормозного излучения протона 45
Е. А. Крюкова

Рождение частиц в расширяющихся пространствах 46
И. А. Белькович

Новый вакуум в голоморфной теории высших спинов в $AdS4$ 47
И. С. Фаляхов

О моделях открытых квантовых систем с непрерывным спектром в пределе малой плотности 48
И. А. Лопатин, А. Н. Печень

Представления алгебры Ли группы диффеоморфизмов *d*-мерного пространства 49
М. И. Гозман

Эффект аксионного обмена в энергию литий-подобных ионов 51
Р. Р. Абдуллин

Модель инфляции без начальной сингулярности 52
Р. Р. Кагиров

Деформация поливекторами решений IIB супергравитации 54
Т. А. Петров, Э. Т. Мусаев

Применение точно решаемых уравнений Шредингера для получения аналитических потенциалов с эффектами туннелирования 56
Н. М. Колганов, Ф. М. Хасанов

Нелинейные уравнения в теории открытых квантовых систем на основе проекционных операторов 57
Х. Ш. Меретуков, А. Е. Теретенков

Билинейные токи в теории высших спинов на AdS_4 58
Ю. А. Татаренко

СЕКЦИЯ БИОФИЗИКИ 60

Исследование воздействия L-метионин-гамма-лиазы на quorum sensing системы бактерий рода *Vibrio* 60
А. А. Ясковец, В. О. Матвеева, Н. А. Бондарев, С. В. Баженов, Д. Ф. Багаева, И. В. Манухов

Метод выбора одиночных мутаций с помощью ProteinMPNN и LigandMPNN 61
А. Д. Бугрова, И. Ю. Гущин

The study of amyloid beta peptide precursor intramolecular interactions for the development of methods for the treatment of neurodegenerative diseases 61
T. A. Btaih, I. S. Okhrimenko, Y. A. Zagryadskaya, D. S. Kaplun

Разработка диффузионно-контролируемой модели кластеризации фибрина 62
А. А. Сибирякова, А. И. Лобанов, С. В. Панюков, Д. А. Чермошенцев

Изучение механизма регуляции экспрессии гена ферритина А в клетках *Escherichia coli* 65
А. Д. Гребенникова, С. В. Баженов, И. В. Манухов

Исследование архитектуры светособирающих комплексов LH2 и LH1-RC из пурпурной серной бактерии *Ectothiorhodospira haloalkaliphila* 66
А. Д. Бурцева, Т. Н. Баймухаметов, И. О. Илясов, М. А. Большаков, А. А. Ашихмин, К. М. Бойко

Функциональная характеризация микробного родопсина с DTG/DTS мотивом из бактерии *Methylobacterium populi* 67
А. М. Свистунов, А. А. Привалов, Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович, Ф. М. Цыбров

Активация *lux*-оперона бактерий рода *Photorhabdus* 68
В. В. Фомин, С. В. Баженов, В. О. Матвеева, И. В. Манухов

Профиль липидной специфичности основного регуляторного сайта термочувствительного ионного канала TRPV1 (по данным вычислительного эксперимента) 69
И. И. Веретененко, Ю. А. Трофимов, Р. Г. Ефремов

Влияние высокого давления Ar и Kr на структуру вирусного родопсина ОЛПВР1 71
В. А. Поспелов, С. С. Бухдрукер, В. И. Борщевский

Моделирование комплексов AMPA-рецепторов со светочувствительными блокаторами 71
Г. А. Курницкий, П. Е. Волынский, А. А. Василевский

Экофизиологическое значение актинородопсинов 72
Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович

Исследование образования и определение размеров инактивированного актина с использованием малоуглового рентгеновского рассеяния 73
Д. Д. Куклина, О. И. Поварова, Е. А. Дронова, Ю. А. Антифеева, К. К. Туроверов, И. М. Кузнецова, Ю. Л. Рижиков

Характеризация новых микробных родопсинов — потенциальных инструментов оптогенетики 75
Д. В. Дорогинин, А. А. Алексеев, Ф. М. Цыбров

Создание стабильной клеточной линии, экспрессирующей микробный опсин в плазматической мембране клеток 76
Д. Ф. Багаева, А. А. Ясковец

Исследование доменной архитектуры гистидиновых киназ в *Green Algae* 76
Е. В. Лаптенкова, Е. В. Зиновьев

Экспрессионный вектор pBMS10 на основе элементов LuxR-LuxI quorum sensing системы *Aliivibrio logei* . 78
Е. С. Щеглова, С. В. Баженов, И. В. Манухов

Новый флавин-связывающий флуоресцентный белок с большим стоксовым сдвигом 79
Е. А. Маркеева, А. С. Николаев, И. Ю. Гущин

Реинжиниринг люмазин-связывающего флуоресцентного белка. 81
Е. А. Кузнецова, А. С. Николаев, И. Ю. Гущин

Исследование процесса образования инактивированного актина при различных условиях с использованием метода МУРР-ГФ 82
И. О. Безручко, О. И. Поварова, Д. Д. Куклина, Е. А. Дронова, Ю. А. Загрядская, И. С. Охрименко, Ю. А. Антифеева, К. К. Туроверов, И. М. Кузнецова, Ю. Л. Рижиков

Структурное исследование мутантных форм эндолизина LysSi3, активного в отношении грамотрицательных полирезистентных бактерий 83
И. О. Матюта, Н. Н. Случанко, Д. В. Васина, К. М. Бойко

Сайт-специфическое спиновое мечение GPCR в нативной мембране 83
И. С. Левашов, И. А. Капранов, Ф. С. Орехов, Н. П. Исаев, В. И. Борщевский

Получение и структурная характеризация октамерного белкового комплекса на основе модифицированного апоферритина 85
М. С. Гетте, В. В. Сударев, С. В. Баженов, О. М. Тилинова, Е. В. Зиновьев, И. В. Манухов, А. И. Куклин, Ю. Л. Рижиков, А. В. Власов

Применение генетически-кодируемых флуоресцентных зондов для детекции функционирования родопсинов в *E. coli* 86
И. А. Ильина, С. М. Бухалович, А. Д. Власова

Экспериментальный и теоретический анализ конкурентного связывания лигандов с ДНК 87
К. К. Хорунжева, Ю. Д. Нечипуренко

Исследование эффективности амфифильных полимеров SMA и DIBMA для солюбилизации гистидинкиназы NarQ и белка E оболочки коронавируса 88
И. И. Натаров, Е. А. Кузнецова, О. Ю. Семенов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гущин

Влияние одиночных мутаций на свойства фотодекарбоксилазы жирных кислот из *Chlorella variabilis* 89
О. Ю. Семенов, И. И. Натаров, А. С. Кузьмин, А. А. Ремеева, И. Ю. Гущин

Оптогенетические и химические методы воздействия на повышение pH лизосом, ассоциированное с патологиями 90
Н. С. Добрынин, С. Ф. Назарова, В. А. Алехин, В. В. Павлов, С. М. Бухалович, А. Д. Власова, Н. С. Ильинский

Разработка протоколов лиофилизации рекомбинантных бактериальных апоферритинов 91
О. М. Тилинова, М. С. Гетте, В. В. Сударев, С. В. Баженов, Н. А. Бондарев, Ю. Л. Рижиков, И. В. Манухов, А. И. Куклин, А. В. Власов

Биоинформатический поиск структурных белков галофильной археи *Haloquadratum walsbyi* 92
О. В. Семкин, Е. В. Лаптенкова, Ю. Л. Рижиков, Е. А. Дронова

Идентификация галофильных люминесцентных бактерий на основе секвенирования генов «домашнего хозяйства» 94
Р. В. Скрипниченко, С. В. Баженов, И. В. Манухов, В. О. Матвеева, А. А. Уткина

Оптимизация морфометрии дыхательных путей для оценки распределения патогенов 95
С. С. Шаляпин, С. А. Портнов, А. О. Богородский, В. И. Борщевский, М. А. Шевченко

Сравнительный анализ структур высокого разрешения мембранных белков 97
С. А. Журавлев, С. Д. Иващенко, Д. Д. Куклина, А. С. Казанцев, Ю. Л. Рижиков

Подтверждение канальных свойств OLPVR1 98
С. М. Бухалович, В. В. Сударев, Д. В. Сидоров

Исследование архитектуры активного центра тканевой трансглутаминазы человека методами *in silico* 99
С. Д. Иващенко, Е. В. Зиновьев, А. В. Власов

Получение изображения сосудов, ассоциированных с дыхательными путями, на основе спектра генераций вторых гармоник 100
С. А. Портнов, С. С. Шаляпин, А. О. Богородский, В. И. Борщевский, М. А. Шевченко

Исследование олигомеризации трансмембранного домена рецептора RAGE при внесении соматической мутации методом ЯМР-спектроскопии 102
С. М. Долотова, Я. В. Бершацкий, В. А. Лушпа, Д. Д. Плащинская, И. С. Охрименко, Э. В. Бочаров

Основанный на AlphaFold алгоритм предсказывает стехиометрию роторного кольца АТФ-синтазы F-типа от 8 до 27 протомеров 103
С. Д. Осипов, Е. В. Зиновьев, А. А. Анучина, А. Кузьмин, А. В. Минаева, Ю. Л. Рижиков, А. В. Власов, И. Ю. Гущин

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ, ЭЛЕКТРОФИЗИКИ, КВАНТОВОЙ РАДИОФИЗИКИ И ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ И АСТРОФИЗИКИ 104

Усиление эффективности лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии синтетических опаловых матриц с помощью плазмонных частиц 104
А. Н. Маресев, М. А. Шевченко, Н. В. Чернега, С. Ф. Уманская, М. А. Карпов, А. Д. Кудрявцева, В. В. Воронова

Исследование поляризации ядерного спина азотно-вакансионных центров в алмазе с помощью спин-обменных переходов в перпендикулярном поле 106
А. Чернявский, Е. А. Примак, А. М. Козодаев, В. В. Сошенко, П. Г. Вилюжанина, С. М. Дрофа, В. Н. Сорокин, С. В. Большедворский, И. С. Кожокару, А. Н. Смолянинов, А. В. Акимов

Матричная изоляция атомов тулия в аргоне при криогенных температурах 107
А. С. Шульмина, А. А. Двуреченский, Д. И. Проворченко, Д. А. Мишин, Д. О. Трегубов, А. А. Головизин

Расчет электронных термов и сил осцилляторов переходов валентно-связанного аниона CH_2CN^- 108
А. В. Мекшун, А. А. Нариц

Исследование диффузионно-тепловой неустойчивости предварительно перемешанных пламен, стабилизированных на плоской пористой горелке 109
Е. Д. Губарев, Е. В. Серещенко, В. В. Губернов

Лазерная система для захвата в оптическую дипольную ловушку холодных атомов рубидия 112
Б. Умирбаев, Г. А. Вишнякова

Сравнение результатов измерений электронных параметров плазмы зондами Ленгмюра с изоляторами разных размеров 113
А. В. Бернацкий, И. И. Драганов, В. Н. Очкин

Скорость и структура пламен с цепными реакциями 114
К. Д. Хвосточенко, Е. В. Серещенко, В. В. Губернов

Обобщенный мост Эйнштейна-Розена внутри черных дыр 116
К. Э. Прокопьев, В. И. Докучаев

Возможные ограничения на скорости распространения источников нейтрино в джетах активных ядер галактик 117
Л. А. Солнышко, К. Д. Хвосточенко, Е. Е. Нохрина

Игра Изинга с дискретным бинарным беспорядком 119
А. В. Леонидов, М. С. Прусаков

Эффективность генерации терагерцового излучения от энергии лазерного импульса в процессе одноцветной филаментации 121
М. В. Левусь, Г. Э. Ризаев, Д. В. Пушкарев, Т. А. Дик, Л. В. Селезнев

Описание компонент Давыдовского расщепления в спектрах поглощения поляризованного света трубчатыми молекулярными агрегатами 122
С. С. Моритака

Когерентная спиновая динамика в нанокристаллах $CsPbBr_3$ в стеклянной матрице 124
С. Р. Меляков

Изучение временных характеристик излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита 125
С. М. Климович, А. В. Бернацкий, С. Н. Андреев, А. П. Шевелько, С. Н. Цхай, С. Ю. Савинов

Оптимизация пороговых параметров вырожденного четырехволнового смешения в интегральном кольцевом микрорезонаторе с двойной накачкой 126
Н. С. Татаринова, А. Е. Шитиков, И. А. Биленко, В. Е. Лобанов, Д. А. Чермошенцев

Методика быстрого управления диполь-дипольными взаимодействиями в плотном газе рубидия 128
С. В. Климов, С. А. Саакян, В. А. Саутенков, Б. Б. Зеленер

Генерация второй гармоники в плазме лазерного филамента 130
Т. А. Дик, Г. Э. Ризаев, Д. В. Пушкарев, А. В. Корибут, М. В. Левусь, Л. В. Селезнев

Возбуждение радиочастотного перехода в иттербии-171 для квантовых вычислений 131
Н. В. Семенин, М. И. Шакиров, А. С. Борисенко, И. В. Заливако, Ю. П. Аносов

Исследование рентгеновского излучения искрового разряда на установке ЭРГ 132
Я. К. Болотов

СЕКЦИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПРОБЛЕМ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ 134

Глубокое квантовое обучение в цепочках сверхпроводниковых кубитов-трансмонов 134
А. Е. Толстобров, Г. П. Федоров, Ш. В. Сандуляну, Д. А. Калачева, А. Н. Болгар, В. Б. Лубсанов, Ш. В. Кадырметов, А. В. Васенин, П. Ю. Шлыков, А. Ю. Дмитриев, О. В. Астафьев

Индуктивно шунтированные кубиты-трансмоны с высоким ангармонизмом 136
А. С. Кирковский, Д. А. Калачева, Ю. И. Зотова, Г. П. Федоров, А. Ю. Дмитриев, О. В. Астафьев

Локальная электронная структура антиферромагнетика $CeCo_2P_2$, проявляющего эффект Кондо 137
А. А. Минаев, А. С. Фролов, В. С. Столяров

Исследование перехода между фазами целочисленного и дробного эффекта Холла 138
А. М. Никишин, А. А. Марков

Корреляции второго порядка в излучении искусственного сверхпроводникового атома в передающую линию 140
В. В. Воскресенский, А. В. Васенин, А. Ю. Дмитриев, А. Болгар, О. В. Астафьев

Джозефсоновский диодный эффект в СКВИДе с наномостиком, имеющим многозначную ток-фазовую характеристику 141
Г. С. Селезнев, Я. В. Фоминов

Локализованные состояния в направленных случайных сетях 143
Д. С. Кочергин, В. С. Тиселько, А. А. Онучин

Исследование транспортных свойств Джозефсоновских SN/FS наноструктур со спиновой инжекцией 144
Д. А. Клишев, И. С. Лакунов, Т. Е. Голикова, В. В. Рязанов

Нейтронные и синхротронные исследования наноструктур со сверхпроводящими свойствами и сложным магнитным упорядочением 146
В. Д. ЖакетовД. А. Норов

Протекание сверхтекучего тока в неоднородных сверхпроводниках 147
О. Б. Зуев, М. А Скворцов

Эффекты волнового смешения в каскадных системах сверхпроводниковых кубитов 149
Т. Р. Сабиров, А. Ю. Дмитриев, С. А. Гунин, А. В. Васенин, О. В. Астафьев

Акустический лазер на основе искусственного атома, связанного с фононным кристаллом 150
П. Ю. Шлыков, Ш. В. Сандуляну, А. Болгар, О. В. Астафьев

СЕКЦИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 152

Численное моделирование процессов синтеза неорганических соединений фторидов при ГНК в КГМТУ 152
В. А. Юсим, С. Э. Саркисов, Р. К. Калимуллин, К. В. Кондратьев

Разработка программного солвера на GPU CUDA для решения уравнения релаксации для однородного газа 153
А. А. Шульгин, Ф. Г. Черемисин, Ю. Ю. Клосс

Динамическая диэлектрическая спектроскопия фторированного жидкого кристалла Т3419 155
А. Д. Курилов, А. В. Губарева, М. К. Кузьмин, М. М. Кузнецов, Д. Н. Чаусов

К вопросу о совершенствовании технологии синтеза монокристаллов методом ГНК путем разработки и использования математических моделей 156
Ф. А. Юсим, К. В. Кондратьев, В. А. Юсим, С. Э. Саркисов, Ю. Ю. Клосс, Л. В. Иванова

Исследование расходимости молекулярного пучка в коллиматоре в зависимости от наличия подкачки газа в резервуар 157
Е. Комаров, О. В. Воронова, Ю. В. Широковская

Влияние γ-облучения на оптические и энергетические спектры фторидных одно- и многокомпонентных кристаллических систем, активированных ионами Ce3+ 158
С. Э. Саркисов, В. А. Юсим, Ю. Ю. Клосс, Ф. А. Юсим

Примесный и гамма-стимулированный эффект увеличения прозрачности кристаллов CaF_2 в области фундаментального края 159
С. Э. Саркисов, В. А. Юсим, Т. А. Сазыкина, А. С. Рябушенко

Исследование методов решения дифференциального уравнения Больцмана с ненулевой правой частью, включая использование процессора Intel и видеокарты Nvidia 160
Е. Комаров, Ю. Ю. Клосс, И. В. Говорун, Л. А. Сазыкина

Тонкопленочные многослойные прозрачные токопроводящие структуры вида ITO/Ag/ITO для OLED дисплеев 161
Н. С. Паращук, А. Д. Курилов, С. А. Стахарный, А. В. Нуриев, А. А. Морозов, К. М. Кузьмин, Д. Н. Чаусов

Параллельный программный солвер кинетического уравнения Больцмана на основе технологии MPI 162
Я. М. Жихарев, А. В. Рябушенко, Т. А. Сазыкина

Аппаратно-программный комплекс для исследования электрооптических параметров нематических жидких кристаллов 163
И. С. Чекулаев, А. Д. Курилов, Д. Н. Чаусов, В. В. Беляев, В. А. Жачкин, М. К. Кузьмин

Исследование структуры ударной волны в газовой смеси на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана 165
С. С. Ситников, Ф. Г. Черемисин

Моделирование разделения смеси газов в многоступенчатом микронасосе методами кинетической теории 167
Я. М. Жихарев, Ф. Г. Черемисин, Ю. Ю. Клосс

Вязкоупругие свойства тридецилата холестерола с наночастицами азот-допированного малослойного графита 168
Р. Н. Кучеров, А. Д. Курилов, А. И. Смирнова, Н. В. Усольцева, М. М. Кузнецов, Д. Н. Чаусов

СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ МНОГОМАСШТАБНОГО АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 170

Новый алгоритм для расчета контактного угла бинарных смесей в нанопорах 170
А. А. Семенчук, И. В. Копаничук, Н. Д. Кондратюк

Моделирование взаимодействия флавинмононуклеотида (ФМН) с кислородом в белке miniSOG 171
А. Р. Блинов, Б. Л. Григоренко

Алгоритм CROP для ускорения сходимости итерационной процедуры решения уравнений релятивистского метода связанных кластеров 172
А. С. Румянцев, А. В. Олейниченко, А. В Титов, А. В. Зайцевский

Молекулярно-динамическое моделирование распространения звуковых волн в воде 173
А. А. Шуплецова, В. В. Стегайлов

Релятивистский метод связанных кластеров для моделирования электронных состояний и свойств систем с открытыми оболочками 174
А. В. Олейниченко, А. В. Зайцевский, Л. В. Скрипников, А. С. Румянцев, Ю. В. Ломачук, Н. С. Мосягин, Э. Элиав, А. В. Титов

Нарушение соотношения Стокса–Эйнштейна при высоких давлениях 175
Б. И. Никитюк, В. В. Писарев

Изучение характеристик смесей органических жидкостей методами молекулярной динамики 177
В. И. Дещеня, Н. Д. Кондратюк

Влияние протонного переноса на диффузию ионов H_3O^+ и OH^- в воде 178
В. Д. Негодин

Определение равновесных концентраций H и $H2$ в расплаве Pb при помощи первопринципных метадинамических расчетов 180
Г. В. Хнкоян, В. С. Николаев, В. В. Стегайлов

Моделирование двойного электрического слоя в концентрированных растворах электролитов методами молекулярной динамики 181
Г. К. Вандышев

Отклонение от обобщенной теоремы о равнораспределении средней кинетической энергии как естественная мера невзаимности в активной материи 182
Д. А. Колотинский, А. В. Тимофеев

Проблемы ускорения молекулярно-динамических вычислений на гибридных суперкомпьютерах 183
Д. Г. Павлов, В. В. Стегайлов

Анализ динамики пылевых частиц в криогенном плазменно-пылевом эксперименте 184
В. С. Николаев, А. В. Тимофеев, Д. Д. Тюбаев

Моделирование молекул хлорофилла Chl-a в воде 186
Е. И. Игольников, В. В. Стегайлов

Свободная энергия образования точечных дефектов при конечных температурах 187
Е. А. Лобашев, Н. А. Фоминых, А. С. Антропов, В. В. Стегайлов

Локальный критерий плавления для малых систем 188
И. В. Аверин, А. В. Тимофеев, В. С. Николаев

Анализ сети водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана методом молекулярной динамики 189
И. К. Бакулин

Тождества Уорда для магнитных фаз допированной двумерной модели Хаббарда: аналитические результаты и численные расчеты методом DMFT 190
И. А. Горемыкин, А. А. Катанин

Исследование структуры и свойств молекулы ThF^+ релятивистским методом связанных кластеров 193
И. Г. Кожевников, А. В. Олейниченко

Фазовый переход в жидком кристалле 5CB 194
Н. А. Касапенко, Н. Д. Кондратюк

Рамановский спектр GeS_2 из первых принципов 195
К. В. Кравцов, И. А. Завидовский, И. А. Круглов

Моделирование краевых дислокаций методом молекулярной динамики: сравнение гцк алюминия и мононитрида урана 196
Л. С. Пилюгин, В. В. Стегайлов

Упругие свойства, пиролиз и диффузия газа в керогенах по данным атомистического моделирования 197
М. С. Алексеева, М. А. Логунов, А. А. Ананьев, А. Н. Хлюпин, Н. Д. Кондратюк

Поляронный транспорт в феррите никеля $NiFe_2O_4$ 198
Н. А. Фоминых, В. В. Стегайлов

Верификация межатомных потенциалов по вязкости и растворимости для моделирования жидких мембран 199
О. В. Кашурин, Н. Д. Кондратюк, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман

Адсорбция и поверхностное натяжение на границе жидкостей в системе вода-толуол-н-додекан 201
О. М. Смирнов, В. В. Писарев

Описание процесса растворения хромистой шпинели в контакте с жидким расплавом свинца-висмута с помощью локально равновесного термодинамического подхода 202
П. А. Дусман, Д. А. Колотинский

Квантово-химическое моделирование электронной структуры галогенидов иттербия при помощи методов связанных кластеров 203
П. А. Хадеева, В. М. Шахова, Ю. В. Ломачук, Н. С. Мосягин, А. В. Титов

Автоматический поиск корреляций физических величин на основе синтетических данных 205
Р. И. Хузин, М. А. Орехов

ARTEMIS: изучение аллостерической коммуникации биомолекул 206
Р. А. Маллаев, А. А. Полянский

Улучшение прогнозирующей способности моделей машинного обучения через расширение признакового пространства с использованием расчетов ThermoCalc 207
И. С. Трофимов

Молекулярно-динамическая модель связывающего лед белка 208
Р. Е. Цинявский, В. В. Стегайлов

Нейротоксин BeKm-1 блокирует каналы hERG при помощи незаменимого остатка аргинина: анализ *in silico* модели комплекса 209
Я. И. Заварзина, А. А. Василевский, А. О. Чугунов

СЕКЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ ФИЗИКИ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ 211

Исследование декогеренции в полупроводниковых двухточечных наноструктурах 211
А. Е. Бердашкевич, Л. Е. Федичкин

Реализация генератора случайных чисел на одиночных фотонных состояниях при помощи бифотонов 212
А. Д. Мищенко, А. Д. Забродин

Связь основных информационных величин с параметрами пост-обработки в условиях квантовой криптографии 213
А. И. Пьянков

Исследование источника энтропии на базе лавинного пробоя в P–N-переходе при различных внешних воздействиях 214
В. В. Царук

Использование своп теста для верификации запутанности квантовых систем методом запутанных многогранников 216
В. А. Орлов

Использование провала Манделя в квантовой фотометрии 218
В. А. Мещеряков, А. А. Гаврилов, М. В. Лебедев

Вариационный алгоритм подготовки состояний на зашумленных ионных квантовых вычислителях 219
З. И. Саяпин, Д. С. Рабинович, Ш. Адхикари

Кинематические ландшафты в задачах управления открытыми квантовыми системами 220
И. Т. Русских

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА 222

Реализация элементов сверхпроводящих нейроморфных систем 222
А. С. Ионин, Ф. А. Разоренов, С. В. Егоров, Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравин, И. Е. Тарасова, В. В. Больгинов

Плазменные возбуждения в двумерной электронной системе с боковой экранировкой 223
А. М. Зарезин, В. М. Муравьев, П. А. Гусихин, И. В. Кукушкин

Структурные и оптические свойства InAs/GaSb сверхрешетки с краем фундаментального поглощения в дальнем ИК-диапазоне 225
А. Р. Дубовая,В. С. Кривобок, И. И. Минаев, Г. Н. Ерошенко, А. В. Клековкин

ЭПР-спектроскопия ферромагнитного перехода двумерной сильно коррелированной электронной системы в режиме квантового эффекта Холла 227
Г. А. Николаев, А. Р. Хисамеева, С. А. Андреева, А. В. Щепетильников, И. В. Кукушкин

Спектроскопия отражения многослойных Ван-дер-Ваальсовых структур с монослоями дихалькогенидов переходных металлов 228
Г. М. Голышков, А. В. Черненко, А. С. Бричкин

Влияние концентрации активатора на спектрально-люминесцентные и сцинтилляционные характеристики кристаллов ИАГ:Ce 230
Е. С. Салтанова, В. А. Федоров

Чувствительность проводящих свойств графена к высыхающим каплям 231
И. А. Бетке

Численное моделирование сверхпроводящих интерферометров 232
И. Е. Тарасова, Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравин, А. С. Ионин, Ф. А. Разоренов, В. В. Больгинов

Угловые зависимости распыления InSb фокусированным пучком ионов галлия 234
К. Н. Лобзов, М. А. Смирнова, Л. А. Мазалецкий, Д. Э. Пухов

Микромагнитное моделирование динамики переключения гетероструктуры мультиферроик/ферромагнетик в МЭСО-устройствах 235
Л. Г. Натекин, К. А. Звездин, П. Н. Скирдков

Наблюдение ферромагнитного фазового перехода в сильно-коррелированной системе с псевдоспиновой степенью свободы в условиях приложенного механического напряжения 236
С. А. Андреева, А. В. Щепетильников, А. Р. Хисамеева, Г. А. Николаев, И. В. Кукушкин

Разработка квантового симулятора на основе двумерной муаровой структуры: оптические исследования 237
Э. О. Чиглинцев, А. Н. Абрамов, В. А. Кравцов, А. И. Чернов

Исследование морфологии частиц, полученных безвакуумным электродуговым методом в системе «молибден-бор» 239
Ю. З. Васильева, Ю. А. Некля, М. Ю. Сперанский

Алгебраическая модель несимметричного гаусс-нейрона 240
Ф. А. Разоренов, А. С. Ионин, В. В. Больгинов

СЕКЦИЯ КВАНТОВОЙ ОПТИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ 243

Динамические эффекты увлечения в двухкомпонентном бозе-конденсате 243
А. Ф. Аминов, А. А. Соколик, Ю. Е. Лозовик

Метод оценки концентрации изомеров каротиноидов в растворах на основе полуклассических квантовых расчетов 245
В. А. Курков, Д. Д. Чесалин, Р. Ю. Пищальников

Измерение коэффициента отражения ЭУФ излучения в скользящем падении одноканальным методом 246
В. М. Макарова

Фотогенерация синглетного кислорода при УФ-возбуждении Ван-дер-Ваальсовых комплексов изопрена с кислородом C_5H_8–O_2 в молекулярном пучке 248
В. М. Роговешко, А. В. Бакланов

Временная динамика интенсивности фотолюминесценции квантовых точек теллурида кадмия 249
Д. С. Дайбаге, С. А. Амброзевич, А. С. Селюков

УФ микроскоп для исследования биотканей в области 210–400 нм 251
Д. О. Сариева, Ю. Г. Вайнер, В. Н. Крашенинников

Идентификация каротиноидов с иононовыми кольцами в составе концевых групп молекул методом спектроскопии комбинационного рассеяния 252
Д. Д. Васимов, А. А. Ашихмин, М. А. Большаков, В. С. Новиков

Сцинтилляционные детекторы на основе оксидов со структурой перовскитов 254
И. А. Захарчук, А. С. Селюков, М. И. Данилкин, Б. И. Заднепровский, С. А. Амброзевич, М. Э. Гехт

Люминесцентная термометрия на кристаллах с редкоземельными ионами 256
М. Диаб, К. Н. Болдырев, М. Н. Попова

Синтез сильнолегированных бором наноалмазов пиролизом 9-борабицикло[3,3,1]нонан димера под давлением 257
К. М. Кондрина, С. Г. Ляпин, А. А. Ширяев, Ю. В. Григорьев, Н. М. Щелкачев, Е. А. Екимов

Исследование спектра вакуумного ультрафиолета экспериментального источника излучения на основе лазерной плазмы лития 259
Л. В. Степанов, Н. Д. Матюхин, В. М. Губарев, М. С. Кривокорытов

Плазменно-пучковый режим разряда низкоиндуктивной вакуумной искры 260
Н. Д. Матюхин, Л. В. Степанов

Картирование молекулярных потенциалов с помощью спектроскопии накачки-зондирования 261
С. Н. Блинов, В. В. Кимберг, Ф. Х. Гельмуханов, С. П. Полютов

Влияние введения фторсодержащих заместителей в состав ацетилацетонового лиганда на фотофизические свойства комплексов Eu^{3+} с ним 264
И. В. Тайдаков, М. Т. Метлин, В. М. Коршунов, С. Р. Заниздра

Исследование формы линий в оптических спектрах кристаллов $Y(Al)_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} 266
Т. А. Иголкина, Е. П. Чукалина

Учет динамики колебательно-возбужденных состояний водорода в нестационарной модели газовой атмосферы вблизи плазменного источника излучения 268
Т. Линкова

Повышение точности ратиометрических люминесцентных термометров с помощью машинного обучения 269
Т. А. Поликовский, В. М. Коршунов, М. Т. Метлин, И. В. Тайдаков

СЕКЦИЯ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И СОВРЕМЕННОЙ АСТРОФИЗИКИ 272

Экспериментальная методика исследований и контроля характеристик полярной ионосферы 272
А. Д. Соколов, А. К. Кузьмин

Моделирование рентгеновских спектров от ударных волн в астрофизических объектах 274
А. Н. Нежин, Н. С. Лыскова, И. И. Хабибуллин, Е. М. Чуразов

Генерация вспышек блазаров в гамма-диапазоне 275
А. Р. Сяйфетдинов, М. М. Лисаков

Перспективный спектрометр электронов для миссии Венера-Д 276
А. И. Петух, Д. А. Моисеенко

Моделирование и калибровка детектора СГС/Чибис-АИ для регистрации поляризации гамма-излучения 277
А. А. Мкртчян, А. С. Позаненко, П. Ю. Минаев, А. О. Стрижак, А. П. Ивашкин

Резонансное взаимодействие электронов со свистовыми волнами как механизм передачи энергии между различными группами частиц 278
А. А. Лужковский, Д. Р. Шкляр

Восстановление профиля концентрации излучающей плазмы в релятивистском стратифицированном джете 280
В. А. Фролова, Е. Е. Нохрина

Исследование оптических и микрофизических свойств аэрозоля надоблачной дымки Венеры по данным спектрометра СУАР 282
А. Р. Непоп, М. С. Лугинин, А. А. Федорова, О. И. Кораблев

Наблюдения центрального звездного диска Млечного Пути в рентгеновских лучах по данным телескопа ART-XC им. Павлинского обсерватории СРГ 284
В. О. Незабудкин, Р. А. Кривонос

Начальное распределение магнитных углов классических радиопульсаров 285
Е. А. Токарева, А. В. Бирюков

Вычисление ускоряющего потенциала и профиля плотности плазмы в магнитосфере ортогональных пульсаров 287
А. Ю. Истомин, Ф. А. Князев, В. С. Бескин

Спектр магнитогидродинамической турбулентности при наличии внешнего азимутального магнитного поля в приближении β-плоскости 288
К. А. Дроздов, А. С. Петросян

Фотохимическая модель ионосферы Марса 289
Д. А. Кошкина, А. С. Петросян

Наблюдения MMS интенсивных токовых структур и неидеальных электрических полей совместно с распространяющимися во внешнем плазменном слое ускоренными электронными пучками 291
М. В. Леоненко, Е. Е. Григоренко

Методика исследования физических свойств хозяйских галактик событий приливных разрушений звезд 293
М. В. Мочалина, С. Ю. Сазонов , Г. А. Хорунжев

Малогабаритный спектрометр для университетского спутника 293
М. А. Сафронова, Е. И. Ольшевский

Холловская магнитная гидродинамика во вращающейся частично ионизованной плазме. Линейные волны295
Т. В. Галстян, Д. А. Климачков, А. С. Петросян

Поглощение в линии 21 см в догалактическую эпоху 296
Ю. Н. Ерошенко

Количественный анализ спектров звезд типа UX Ori. звезда UX Ori и CQ Tau 298
П. Димитриева, В. П. Гринин

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ 299

Исследование фазовой диаграммы сверхтугоплавкой системы Ta-Zr-C 299
А. С. Булава, А. М. Фролов, М. А. Шейндлин

Динамика коллоидных частиц в цепочечных структурах в разряде постоянного тока 300
А. В. Ерилин, К. Г. Косс, Е. А. Кононов, М. М. Васильев, О. Ф. Петров

Противофазное подавление неустойчивости поперечного течения с помощью многоканального плазменного актуатора 301
А. А. Абдуллаев, А. Я. Котвицкий, И. А. Моралев,М. В. Устинов

Методика обработки экспериментальных данных по тепловому расширению при импульсном нагреве.... 303
А. Ч. Гаврильев, В. Н. Сенченко, С. А. Мельников

Распределение электрического потенциала в аксиально несимметричном отражательном разряде 305
А. П. Ойлер, А. В. Гавриков

Веб-приложение для расчета колебательно-вращательного спектра по кривым потенциальной энергии ... 307
А. В. Кравченко, М. А. Мальцев

Исследование транспортных свойств металлов в твердой и жидкой фазах на основе первопринципных расчетов 308
И. С. Гальцов, В. Б. Фокин, Д. В. Минаков

Моделирование распределения температурного поля в графитовом тигле при воздействии дугового разряда постоянного тока 309
Г. А. Блейхер, А. Я. Пак, Д. Е. Стовпец

Моделирование горения метана в присутствии электрического разряда..... 311
Д. А. Тарасов, А. А. Фирсов

Эволюция активной броуновской системы в ВЧ-разряде..... 314
Д. А. Заморин, Р. А. Сыроватка

Уравнение состояния жидкого никеля при высоких давлениях и температурах 316
К. А. Боярских, К. В. Хищенко

Поиск оптимальных частот в задаче интенсификации смешения поперечной струи со сверхзвуковым потоком с помощью локального импульсного энерговыделения 317
Л. С. Волков, А. А. Фирсов

Экспериментальное исследование крупномасштабной вращающейся плазменной структуры в асимметричной конфигурации отражательного разряда с термокатодом..... 318
М. А. Валинуров, Р. А. Усманов, А. П. Ойлер, А. В. Гавриков

Уравнение состояния смеси кварца с алюминием при высоких плотностях энергии 319
Н. Н. Середкин, К. В. Хищенко

Экспериментальное исследование изменения плотности тугоплавких металлов при высоких температурах и в жидкой фазе 320
С. А. Мельников, В. Н. Сенченко

Изменение характера движения в системе активных броуновских частиц при внешнем воздействии 321
Р. В. Сеношенко, Е. А. Кононов, М. М. Васильев, О. Ф. Петров

Механизм формирования цепочечных структур в плазме тлеющего разряда постоянного тока 322
В. В. Литвиненко, М. М. Васильев, А. В. Федосеев, О. Ф. Петров

СЕКЦИЯ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ 324

Аналитическое решение уравнений упругости для цилиндрически-ортотропного материала, имитирующего топливную таблетку с трещинами 324
К. А. Данилов, В. Г. Зборовский, К. Е. Улыбышев

Оценка образования водорода при аварии с двусторонним разрывом контура охлаждения дивертора на установке ИТЭР 326
Н. Д. Гембицкий, К. С. Долганов, А. Д. Васильев, В. Н. Семенов

СЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ И НАНОФОТОНИКИ 329

Управляемое осаждение биологических аналитов на примере альбумина и миоглобина с помощью физических методов для проведения качественного и количественного ГКР-анализа 329
А. Р. Нигматулин, И. А. Богинская, К. А. Верещагин, К. Н. Афанасьев, М. В. Седова, И. А. Рыжиков

Жесткий режим генерации в системе с оптомеханической неустойчивостью 330
А. Мухамедянов, А. А. Зябловский, Е. С. Андрианов

Метод измерения диэлектрической проницаемости с использованием программного обеспечения встроенных вычислительных систем 331
А. П. Седов, В. Д. Бурцев, Н. М. Назаров, Д. С. Филонов

Уменьшение неравномерности поля сформированного плоской линзой 333
Д. П. Королев, В. С. Солосин, Н. Л. Меньших

Переход от неоднородного к однородному уширению ниже порога генерации 335
И. С. Пашкевич, И. В. Доронин

Модель открытой квантовой системы для описания эрбиевого лазера с учетом парного взаимодействия атомов эрбия 335
И. В. Вовченко, Е. С. Андрианов, А. В. Дорофеенко, А. М. Смирнов, О. В. Бутов

Определение сердечного ангиотензинпревращающего фермента в крови на основе спектров ГКР с использованием методов машинного обучения 336
Р. Р. Сафиуллин, И. А. Богинская, Н. Л. Нечаева, В. Е. Тихомирова, О. В. Крюкова, О. А. Кост, К. Н. Афанасьев, И. А. Рыжиков, Н. И. Булаева, Е. З. Голухова

Разработка термостойкого просветляющего покрытия кремниевого ИК-прозрачного окна в диапазоне 3–5 мкм для микроболометров 337
С. А. Баженова, В. И. Полозов, А. С. Набоко, К. Н. Афанасьев, И. В. Быков, И. А. Рыжиков, А. М. Мерзликин

Разработка метода микроструктурирования поверхности кремния для просветления кремниевых окон микроболометрических датчиков в дальнем ИК-диапазоне 338
Ф. М. Балаховский, В. И. Полозов, А. В. Дорофеенко, А. С. Набоко, К. Н. Афанасьев, И. В. Быков, И. А. Рыжиков, А. М. Мерзликин

Оценка эффективности ГКР активных подложек из самоорганизованного серебра для длины волны возбуждения 532 нм 339
Я. Л. Поздняк, И. А. Богинская, И. А. Рыжиков, К. Н. Афанасьев, М. В. Седова

СЕКЦИЯ «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОСМОЛОГИЯ» 341

Измерение энергии нейтронов прототипом высокогранулярного нейтронного детектора в столкновениях Xe+CsI@3,8 АГэВ под 0 градусов в физическом сеансе эксперимента BM@N 341
А. А. Зубанков

Полноразмерный времяпролетный детектор нейтронов для эксперимента BM@N 342
А. И. Махнев

Измерение формы адронного ливня в калориметрическом детекторе эксперимента ATLAS 344
А. Д. Тропина, Н. А. Гусейнов, И. Р. Бойко

Концепции сцинтилляционного детектора нейтрино со сверхнизким энергетическим порогом 346
А. О. Стрижак, А. Г. Баранов

Изучение распада B_s^0→J/ψфф в эксперименте CMS 348
А. С. Седельников, Р. Н. Чистов

Применение методики слепого анализа к поиску событий конверсионного распада омега-мезона в эта-мезон и электрон-позитронную пару 349
А. К. Нарваткина

Определение момента времени столкновения пучков на установке ALICE Большого адронного коллайдера (ЦЕРН) в сеансе Run 3 351
А. А. Фурс, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, М. А. Суханов

Обнаружение и измерение относительной вероятности распада $B^0 \longrightarrow \psi(2S)\phi Ks^0$ в эксперименте CMS 351
А. В. Богер, Р. Н. Чистов

Разработка датчиков положения и фазы пучка для линейных резонансных ускорителей ионов 353
В. Е. Амосова, С. А. Гаврилов

Поиск событий, индуцированных фотонами высоких энергий, в эксперименте по исследованию космических лучей Tunka-Grande 355
В. В. Шлыков, И. В. Харук

Поиск CP-нарушений в распадах D^0-мезонов в эксперименте CMS 357
В. С. Сергейчик, С. М. Поликарпов

Увеличение эффективности отбора продуктов реакций мюонных нейтрино в ближнем детекторе ускорительного эксперимента T2K 359
Д. В. Федорова, А. О. Измайлов

Разработка интегрирующего датчика тока электронных пучков пикосекундной длительности 360
И. И. Полоник, С. А. Гаврилов

Моделирование нейтроноводного канала импульсного источника РАДЭКС 362
Д. А. Бучный, В. С. Литвин, Д. Н. Трунов, Р. А. Садыков

Обнаружение распада $\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-$ и изучение Ξ_b^{*0} бариона в эксперименте CMS 363
К. М. Иванов

Применение классификации и регрессии для анализа данных эксперимента по поиску 2K-захвата Xe-124365
К. А. Сегал

Исследование устойчивости особых точек ренормгруппового потока потенциала Хиггса 366
М. В. Елисов, М. В. Долгополов

Вычисление скорости счета нейтрино от отдельных источников и оценка атмосферного фона в установке Baikal-GVD 367
Д. Н. Заборов, М. И. Клейменов

Восстановление спектра антинейтрино в эксперименте DANSS 369
Н. А. Машин

Модернизация передних детекторов в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере (ЦЕРН) .. 370
М. А. Суханов, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, А. А. Фурс

Исследование инклюзивных полулептонных распадов Bs мезонов в эксперименте Belle 371
Н. А. Петерс, П. Н. Пахлов

Возможности сцинтилляционного детектора LVD для изучения мюонов высоких энергий 372
О. Ю. Слуцкая, Н. Ю. Агафонова, LVD-коллаборация

Исследование угловых корреляций в реакциях неупругого рассеяния на быстрых нейтронах 374
П. Г. Филончик, А. Л. Барабанов, Д. Н. Грозданов, Н. А. Федоров, Ю. Н. Копач

Исследование характеристик амплитудно-временного нейтронного детектора на космическом излучении 376
С. М. Ахмад, В. А. Басков, А. И. Львов

Проверка симметрии спектров бета- и антинейтрино при бета-распаде 378
С. В. Ингерман, В. В. Синев

Возможные способы преодоления критической энергии поляризованным протонным пучком в комплексе NICA 379
С. Д. Колокольчиков, Ю. В. Сеничев, А. Е. Аксентьев, А. А. Мельников

Учет кулоновского взаимодействия в редких распадах B-мезонов 380
С. И. Манухов

Изучение декогеренции в процессе комптоновского рассеяния запутанных аннигиляционных фотонов ... 382
С. А. Мусин

Использование метода эффективного потенциала для анализа классических решений в модели Фридберга–Ли–Сирлина 384
Э. С. Ким, Э. Я. Нугаев

СЕКЦИЯ «ИТЭР — ШАГ В ЭНЕРГЕТИКУ БУДУЩЕГО» 386

Машинное обучение для нейтронной эмиссионной томографии в реальном времени с использованием сигналов диагностики вертикальная нейтронная камера ИТЭР 386
А. С. Жаров, Г. Е. Немцев, Т. М. Кормилицын, Р. Н. Родионов

Определение положения шнура плазмы в токамаке МИФИСТ-0 на начальной стадии разряда 387
А. В. Николаева, А. С. Пришвицын, И. И. Пашков, С. А. Крат

Исследование динамики теплового воздействия мощного потока водородной плазмы на поверхность вольфрамовой мишени с предварительно напыленным слоем висмута 388
А. В. Пушина, Д. А. Бурмистров, С. В. Карелов, С. Д. Лиджигоряев, И. М. Позняк, Д. А. Топорков

Расчетное исследование работоспособности сборки гибкой опоры бланкета ИТЭР в аварийном режиме работы 390
Б. И. Никулин, И. И. Поддубный, М. Н. Свириденко, А. Б. Путрик

Моделирование влияния эффектов гало и cross-section на работу активной спектроскопической диагностики на установке ИТЭР 391
Г. С. Павлова, С. В. Серов, С. Н. Тугаринов, А. Ю. Шабашов

Применение спектрометра на основе кристалла $LaCl_3$ в качестве монитора нейтронного выхода калибровочного источника ИТЭР 393
Д. С. Фридрихсен, Т. М. Кормилицын, А. В. Панкратенко, С. Ю. Обудовский, Ю. А. Кащук

Использование расчетного кода OpenMC для моделирования нагрузки на конструкционные элементы токамака 394
Е. С. Афанасенко, Д. В. Портнов

Численное моделирование переходных процессов в приповерхностном слое плазмы в экспериментах по имитации условий ЭЛМ и срывов ИТЭР 395
Е. З. Бирюлин, И. А. Алябьев, И. М. Позняк, В. Ю. Цыбенко, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев

Поведение защитного покрытия карбида бора при воздействии плазменного потока на установке КСПУ-Т 396
И. А. Алябьев, И. М. Позняк, В. Л. Подковыров, В. А. Барсук, Е. З. Бирюлин, В. Ю. Цыбенко, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев

Создание концепции измерения Z_{eff} для токамака ТРТ 398
И. А. Макаренко, Н. В. Кузьмин, С. Н. Тугаринов

Методика расчета отношения сигнал-фон для диагностики вертикальная нейтронная камера ИТЭР 399
П. А. Ревякин, Г. Е. Немцев, Р. Н. Родионов

Анализ отклика детектора на основе органического сцинтиллятора из состава нейтронного спектрометра ИТЭР 399
Т. И. Семенов, Т. М. Кормилицын, П. А. Ревякин, А. В. Панкратенко, Ю. А. Кащук

СЕКЦИЯ ФОТОНИКИ И ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ 401

Оптическое отражение резонансной брэгговской структурой из 30 сдвоенных квантовых ям InGaN/GaN 401
А. А. Иванов, В. В. Чалдышев

Оптические свойства двуосных ван-дер-ваальсовых кристаллов и их применения 403
А. С. Славич, М. К. Татмышевский, А. Н. Токсумаков, О. Г. Матвеева, Д. В. Грудинин

РезТерагерцевая сегнетоэлектрическая мягкая мода в тонких пленках слабодопированного $SrTiO_3$ 403
А. В. Мелентьев, Е. С. Жукова, Б. М. Некрасов, М. В. Таланов, Б. П. Горшунов

Теоретическая модель типа Фридриха–Винтгена для квазисвязанных состояний в наночастицах типа ядро–оболочка..... 404
А. Эгбали, А. А. Вишневый

Магнитоиндуцированная модуляция эффекта Гуса–Хенхен в магнитофотонных кристаллах..... 405
А. А. Неровная, М. С. Гаврюшина, А. И. Мусорин, И. В. Соболева, А. Ю. Фролов, А. А. Федянин

Кинетика движения и растворения частиц карбоната кальция в оптической ловушке 407
А. А. Ушков

Исследование диэлектрической функции платины..... 408
А. П. Целин

Электросопротивление двухслойного графена, ограниченное электрон-дырочным рассеянием..... 409
А. В. Грибачев, Д. А. Свинцов

Топологические фазовые сингулярности в отражении света от одноосных сред с поглощением 410
В. А. Маслова, Д. Г. Баранов

Синтез гетероструктурных наночастиц методом лазерной абляции для применения в фотокатализе 412
Д. В. Дюбо, И. С. Казанцев, Г. И. Целиков, И. В. Мартынов

Экситон-поляритоны в Ми-войдах 414
Е. Ю. Рябков, Д. Г. Баранов

Влияние некритических степеней свободы на ротационные фазовые переходы в перовскитах 414
Е. Г. Троценко, М. В. Таланов

Химическая и термическая устойчивость нанопленок Bi/InAs(111)A(2x2)..... 415
И. А. Бетке, Н. Ю. Соловова

ГКР-подложки варьируемой морфологии на основе «плазмонных чернил» AgNP/GO 417
И. А. Завидовский, Н. М. Белозерова, М. В. Самоделова, Е. Ю. Афонюшкина, И. С. Казанцев, Д. В. Дюбо, О. О. Капитанова, И. А. Веселова, А. В. Арсенин, С. Новиков

Поляризационная рамановская спектроскопия кристаллов $CrCl_3$ и GeS..... 418
И. Ю. Титов, И. А. Завидовский, А. С. Славич, М. К. Татмышевский, М. А. Кащенко, А. В. Арсенин, С. М. Новиков

Полностью оптическое когерентное управление направлением светового пучка с помощью дифракционной решетки..... 420
К. А. Мамян, А. Ю. Фролов, А. А. Федянин

Аналитическое описание хиральных зеркал при наклонном падении излучения..... 421
К. Д. Алехин

Влияние буферного слоя и анодирования на свойства пленок NbTiN, используемых в приемниках терагерцевого излучения..... 422
К. В. Живетьев, Е. С. Жукова, Б. П. Горшунов, А. В. Терентьев, А. М. Чекушкин, Ф. В. Хан, А. В. Худченко, Н. В. Кинев, В. П. Кошелец

Эффект смачивания поверхности в двумерных ван-дер-ваальсовых материалах для роста ультратонких пленок золота 424
М. С. Миронов, Д. И. Якубовский, И. С. Казанцев, А. В. Арсенин

Определение оптических констант анизотропного в плоскости двумерного материала методом спектральной эллипсометрии 425
М. К. Татмышевский, А. С. Славич

Исследование структуры и фазовых переходов сложных нанокристаллических оксидов железа в широком диапазоне давлений и температур 426
Н. М. Белозерова, С. Е. Кичанов, А. В. Руткаускас, О. Н. Лис, Д. П. Козленко, Е. В. Лукин, Б. Н. Савенко

Обратный эффект Фарадея в пленках феррит-гранатов в ближнем ИК-диапазоне 427
Н. И. Грибова, А. Ю. Федоров, А. Е. Безменова, Д. М. Кричевский, В. Н. Бержанский, В. И. Белотелов

Интерференция Е-волн от пленок из слабо проводящего и прозрачного веществ..... 429
Н. В. Зверев, А. Х. Абдуев, А. А. Зотов

Генерация узкополосного микроволнового сигнала в лазере с внешним резонатором в режиме затягивания частоты на дополнительный высокодобротный микрорезонатор 431
Н. А. Капридов, А. Е. Шитиков, Д. А. Чермошенцев, И. А. Биленко

Изучение оптических свойств ван-дер-ваальсовых материалов методом поляризационной микрорефлектометрии 433
Н. В. Пак, М. К. Татмышевский, А. С. Славич

Признаки pancake-bonding в гидратированных эумеланинах 434
П. А. Абрамов, К. А. Мотовилов

Исследование влияния гибридного анапольного состояния на взаимодействие цилиндрической наночастицы с линейно-поляризованным гауссовым пучком 435
С. Р. Розенталь, Н. С. Бабич, Д. А. Кислов

Применение углеродных нанотрубок для изготовления дифракционных решеток терагерцевого диапазона 438
А. В. Терентьев, И. В. Новиков, Н. И. Рагинов, Д. В. Красников, С. С. Жуков, К. В. Живетьев, Д. А. Илатовский, А. Элакшар, Э. М. Хабушев, А. К. Гребенко, С. А. Кузнецов, С. Д. Шандаков, Б. П. Горшунов, А. Г. Насибулин

СЕКЦИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ, НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР И КВАНТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ 441

SnS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего $NaFe_{1-x}Co_xAs$ 441
А. Д. Ильина, С. А. Кузьмичев, И. А. Никитченков, И. В. Морозов, А. И. Шилов, Е. О. Рахманов, Т. Е. Кузьмичева

Андреевская спектроскопия $KCa_2Fe_4As_4F_2$ 443
А. Т. Даниярходжаев

Влияние дефектной структуры на сверхпроводящие свойства в пниктидах и селенидах железа на основе щелочных металлов 444
А. А. Дегтяренко, И. В. Морозов, Е. О. Рахманов, В. А. Амеличев, Л. А. Моргун, И. В. Жувагин, А. И. Шилов, С. Ю. Гаврилкин, А. Ю. Цветков, С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева

Фазовое расслоение в монокристалле $EuSn_2As_2$ 444
А. Ю. Дегтяренко, А. Л. Васильев Н. С. Павлов, А. В. Овчаров, В. И. Бондаренко, А. В. Садаков, К. С. Перваков, В. М. Пудалов

Изучение транспортных свойств топологического изолятора $SrSn_2As_2$ 445
А. А. Лычагина, С. Ю. Гаврилкин, И. В. Жувагин, В. А. Власенко

Исследование электронной и магнитной структуры магнитных топологических изоляторов на основе $MnBi_2Te_4$ 446
А. А. Наумов, А. С. Фролов

Влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в трехорбитальной модели ферропниктидов 448
Д. А. Иванов, М. М. Коршунов

Поверхностный спин-флоп в магнитном топологическом изоляторе $Ge_{0.4}Mn_{0.6}Bi_2Te_4$ 450
Е. В. Понамарев, А. С. Фролов, В. С. Столяров

Изготовление прибора для измерения восприимчивости флейков слоистых сверхпроводников микронных размеров модуляционным методом 452
Е. М. Иванова

Туннельная спектроскопия пниктидов $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии 453
И. А. Никитченков , С. А. Кузьмичев , К. С. Перваков , В. А. Власенко , А. Д. Ильина , Т. Е. Кузьмичева

Антиферромагнетизм Tb_2Te_5 454
И. К. Шамова, О. С. Волкова

Исследование критического тока, силы пиннинга и фазы вихревого состояния в железосодержащих сверхпроводниках PrFeAsOxFy 456
М. Д. Алиен

СВЧ-генератор на основе Джозефсоновского перехода 457
Р. Тюменев, Д. С. Калашников, В. С. Столяров

СЕКЦИЯ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ 460

Корреляционные функции вырожденных полей в двумерной суперконформной теории поля 460
А. Д. Иванова, А. В. Литвинов

Алгебраическая структура БПС состояний 461
А. Н. Гавшин

Сюръективные рациональные отображения поверхностей дель Пеццо 463
А. М. Леконцева

Непрерывный предел неоднородной шестивершинной модели и интегрируемые системы в конформной теории поля 464
И. И. Гусев, А. В. Литвинов

Исследование минимальных структур симплициального комплекса на расслоениях со слоем S^1 465
Н. С. Белоконев

N=2 суперсимметричные теории высших спинов: компонентная структура 466
А. Л. Нурышева

О массовом спектре мезонов в двумерных квантовых теориях поля на примере модели 'т Хоофта 467
А. В. Литвинов, П. А. Мещеряков

Скорость сходимости в центральной предельной теореме для аддитивных функционалов в точечном процессе с ядром Бесселя 468
С. М. Горбунов

СЕКЦИЯ ФИЗИКИ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ 470

Моделирование измерения отправляемого состояния в протоколе КРК BB-84 с пассивным приготовлением 470
А. А. Двуреченский

Анализ квантовых вычислительных ресурсов при реализации квантовых алгоритмов на многомерных системах 471
А. С. Чудаков

Влияние обратных вспышек в лавинном фотодетекторе на протокол квантового распределения ключей 473
А. А. Реутов

Использование вспомогательных кубитов в разложении вентиля Тоффоли с целью уменьшения количества CNOT операций 475
А. А. Марданова, Е. О. Киктенко

Генерация негауссовых состояний света в схемах с измерениями 476
А. А. Пошевкина, С. Б. Королев

Устойчивость негативности функции Вигнера к потерям 477
Б. Н. Нугманов

Детектирование заданного фазового сдвига с помощью негауссовских состояний света 478
В. Л. Горшенин

Машинное обучение для оптимизации получения конденсата Бозе–Эйнштейна атомов тулия 480
Д. А. Кумпилов, В. В. Цыганок, Д. А. Першин, И. С. Кожокару, В. А. Хлебников, И. А. Пырх, А. Е. Руднев, А. В. Акимов

Общий подход к доказательству секретности дискретных протоколов квантового распределения ключа в реальных системах 482
Е. А. Дедков, Р. А. Шаховой

QASMC — Оптимизирующий транспилятор квантового языка программирования OpenQASM 2.0 483
Д. А. Дрожжин, А. С. Николаева, Е. О. Киктенко, А. К. Федоров

Учет влияния разной эффективности детекторов для установки с пассивным выбором базиса в случае квантового канала спутник земля 484
Е. И. Ивченко, А. В. Хмелев, В. Л. Курочкин

Ли-алгебраические Лиувиллианы 486
Е. Д. Чистякова, А. И. Лотков, А. К. Федоров , Д. В. Курлов

Измерение добротности сверхпроводникового кубита-трансмона..... 487
И. Ю. Горбунов, А. Е. Толстобров, Г. П. Федоров, О. В. Астафьев

Поверхностные моды Дьяконова в кольцевых структурах 488
И. И. Степанов, О. В. Боровкова, И. А. Биленко, Д. А. Чермошенцев

Приготовление квантовых состояний методом оптической инжекции без фазового модулятора 490
И. С. Кудряшов, Р. А. Шаховой

Разработка линейной ловушки Пауля для квантовых вычислений 491
И. С. Герасин, И. А. Семериков

Квазизарядовый сверхпроводниковый кубит на основе сверхиндуктивности в планарной архитектуре 491
А. В. Кузнецова, А. В. Саблук, Н. А. Малеева

Измерение спектральной плотности шума сверхпроводникового кубита-флаксониума 492
Т. А. Чудакова

Измерение утечек при проведении однокубитных операций на сверхпроводниковом кубите-трансмоне .. 494
Н. Г. Березкин, Г. С. Мажорин

Comparing impacts of gate merging and frame dimension increasing for negativity minimization in overcomplete quasiprobability representations..... 496
D. A. Kulikov, V. I Yashin, E. O. Kiktenko, A. K. Fedorov

Fluctuating local field approach for description of the dynamics of closed systems of correlated fermions..... 497
L. D. Silakov, A. N. Rubtsov, Ya. S. Lyakhova

Decoherence effect on the two-qubit entanglement of 40Ca+ ions 499
N. A. Sterligov, N. V. Morozov, L. A. Akopian, A. N. Matveev, O. Y. Lakhmanskaya, K. E. Lakhmanskiy

Program package for simulation and analysis of ion crystals in surface electrode traps 501
A. Podlesnyy, Y. Suleimen, L. Mazhorina, K. Lakhmanskiy

Superfluid transition of disordered dipolar Fermi gases in a 2D lattice..... 503
V. Y. Pinchenkova, S. I. Matveenko, G. V. Shlyapnikov

СЕКЦИЯ ПРИКЛАДНОЙ ГЕОФИЗИКИ 505

Аппроксимация региональных аномалий..... 505
А. С. Долгаль, Н. В. Рыжов

Определение требований к устройству для локального подогрева и поддержания стабильной температуры в четырехэлектродном МЭП..... 508
А. В. Акинина, И. В. Егоров, А. С. Бугаев

Система прецизионного мониторинга температуры горных массивов 510
В. В. Гравиров, Д. В. Лиходеев

Влияние развития трещин в керогене в процессе его созревания на физические свойства флюида пород доманиковой формации 511
В. С. Окуневич, И. О. Баюк

О возможности применения методов компьютерного зрения при обработке результатов расширенного комплекса геофизических исследований скважин 512
Д. Ю. Куприн, Н. В. Дубиня

Поле поверхностной волны типа Рэлея в слоистых плавно неоднородных средах 514
Д. А. Жарков, Р. А. Жостков

Обзор методов исследований естественной трещиноватости и применение геомеханического моделирования на примере конкретного месторождения в реальных условиях для прогнозирования естественной трещиноватости горных пород в определенном регионе 516
И. А. Воронов

Малогабаритный радиоэлектронный цифровой модуль для построения нодальной сейсмической системы, взаимодействующей с БпЛА 517
И. В. Горчаков, В. М. Агафонов А. Н. Антонов

Зависимость изменения радоновых данных с детектора LVD от параметров давления, влажности, температуры 518
Н. Ю. Агафонова, В. В. Ашихмин, Е. А. Добрынина, Р. И. Еникеев, И. Р. Шакирьянова, В. Ф. Якушев, Н. А. Филимонова (от имени коллаборации LVD)

Особенности взаимосвязей механических и электрических свойств горных пород с учетом вечной мерзлоты 520
Л. Р. Календарова

Обработка ограниченного комплекса ГИС для задач комплексной интерпретации данных на примере верхнефаменского подъяруса в пределах Благовещенской впадины и Южно-Татарского свода 522
М. К. Савойская

Исследование зависимости чувствительности электрохимического датчика движения планарного типа от толщины рабочего канала 524
М. В. Кирилловичев, В. В. Левчук

Сегментация Перуанско-Чилийской зоны субдукции и ее влияние на сильнейшие ($M \geq 8$) землетрясения 526
Н. С. Щевьева, И. С. Владимирова

Влияние давлений и температур на показания индуктивных датчиков перемещений в камере сервогидравлической установки 529
Н. А. Егоров, И. В. Фокин

Численное моделирование низкочастотного шумового поля на мелководном участке Карского моря 530
С. Д. Боджона, Д. Д. Сидоров, А. А. Луньков

Исследования температурного поведения молекулярно-электронных преобразователей на основе водно-спиртовых электролитов 532
С. М. Гужов, Д. Л. Зайцев

Двумерные вариационные алгоритмы лучевого трассирования при решении кинематических задач сейсморазведки 533
Ю. А. Гоманюк, П. Ю. Степанов

Программный комитет конференции

Д. В. Ливанов, ректор МФТИ — председатель

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

Члены программного комитета конференции:

Д. А. Гаврилов, *директор ФРКТ*

Т. Е. Григорьев, *директор ИНБИКСТ*

В. В. Иванов, *директор ФЭФМ*

Д. В. Кузьмин, *директор ФБМФ*

С. Негодяев, *директор ФАКТ*

А. М. Райгородский, *директор ФПМИ*

А. В. Рогачев, *директор ЛФИ*

М. В. Сигова, *директор ФБВТ*

А. Е. Сутормина, *директор ИИТП*

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

Организационный комитет конференции

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

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

Члены организационного комитета конференции:

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

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

Е. Р. Жукова, *руководитель проектов ОКПИ*

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

И. Красиков, *руководитель пресс-службы*

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Секция общей физики

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

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

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

Дата: 06.04.2024 Время: 10:00

УДК 39.1.05, 539.1.074.3

Анализ данных сцинтилляционного вето-детектора в эксперименте Short-Range Correlations на BM@N 2022

А. Г. Бочкова[1,2]

[1]Федеральный университет «Дубна»
[2]Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ)

Столкновения тяжелых ионов при высоких энергиях предоставляют уникальную возможность изучения ядерной материи в условиях экстремальных плотности и температуры. На строящемся в Дубне сверхпроводящем коллайдере NICA (Nuclotron based Ion Collider fAcility) на первом действующем эксперименте BM@N (Baryonic Matter at the Nuclotron) в центральных столкновениях пучков тяжелых ионов с энергией до 6 ГэВ и фиксированной мишени можно получить плотности вещества, в 4 раза превышающие среднюю плотность ядерной материи в обыкновенных условиях. В 2017 году физическая программа BM@N была расширена новой темой, ей стало изучение короткодействующих двунуклонных корреляций (SRC — Short-Range Correlations, далее КДК) в ядрах углерода. КДК — это кратковременные флуктуации, при которых два нуклона оказываются на расстоянии порядка 1 фм друг от друга и имеют противоположно направленные импульсы, по модулю превышающие импульс Ферми для данного ядра, а центр масс пары движется с небольшим импульсом подобно нуклонам среднего поля. При этом локальная плотность таких образований превышает среднюю ядерную в 2-3 раза [1–3]. Эксперимент SRC на BM@N в обратной кинематике впервые позволил изучать свойства ядерных фрагментов после квазиупругого жесткого рассеяния ^{12}C(p, 2p)X, когда протон из мишени и протон из ядра углерода, между которыми произошло взаимодействие, регистрируются под углом 30 градусов к пучку при помощи специального двухплечевого спектрометра. Результаты физического анализа данных первого измерения были опубликованы в Nature Physics [4].

Второе измерение SRC на BM@N состоялось в 2022 году. Основной целью этого эксперимента было измерение абсолютных сечений и исследование реакций, в результате которых образуется более одного фрагмента в конечном состоянии. Для достижения этой цели экспериментальная установка была значительно улучшена: были разработаны, собраны, протестированы и установлены два плечевых калориметра, новые сцинтилляционные пучковые счетчики, добавлена сцинтилляционная стенка и детектор VetoBox (рис. 1).

Счетчик VetoBox состоит из 16 сцинтилляционных модулей, разработанных по аналогии со сцинтилляционной стенкой, предназначенной для измерения зарядов легких фрагментов в столкновениях тяжелых ионов [5]. Модули окружают мишень и формируют геометрию, максимально перекрывающую слепую зону двухплечевого спектрометра (рис. 2, рис. 3) для определения событий, в которых есть дополнительные вторичные частицы. Представленная работа направлена на идентификацию неупругих взаимодействий, в которых образовались вторичные частицы, не попадающие в двухплечевой спектрометр. Такие события являются фоновыми относительно исследуемой реакции.

В работе представлены результаты анализа, основанные на разных выборках физических событий с жидководородной и пустой мишенью с условиями на пороговое значение для амплитуды сигнала, типа сработавшего триггера (критерия отбора физических событий), параметра R2 (численного показателя того, насколько возможно получить представление о сформированном сигнале для конкретной ячейки).

Были найдены и предложены пороги амплитуды сигнала и параметра R2 для отделения «шума» и сигнала от заряженной частицы, а также проанализированы спектры амплитуд сигналов для квазиупругих событий и событий с минимальным взаимодействием с мишенью, а также для многотрековых событий.

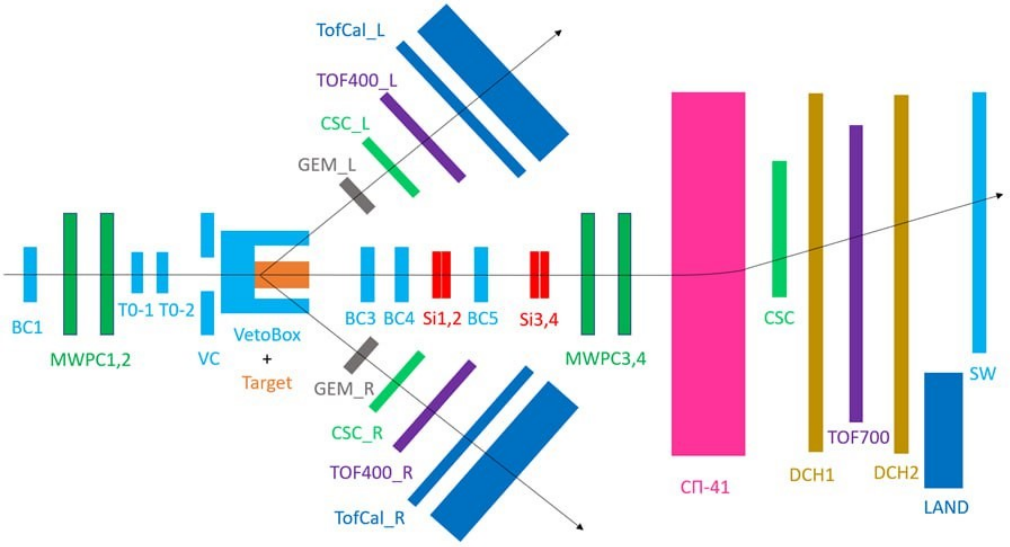


Рис. 1. Схема экспериментального оборудования установки SRC на BM@N 2022

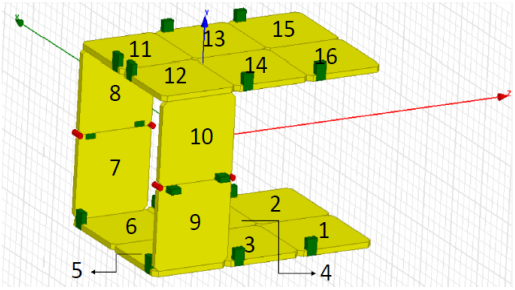


Рис. 2. Геометрия детектора

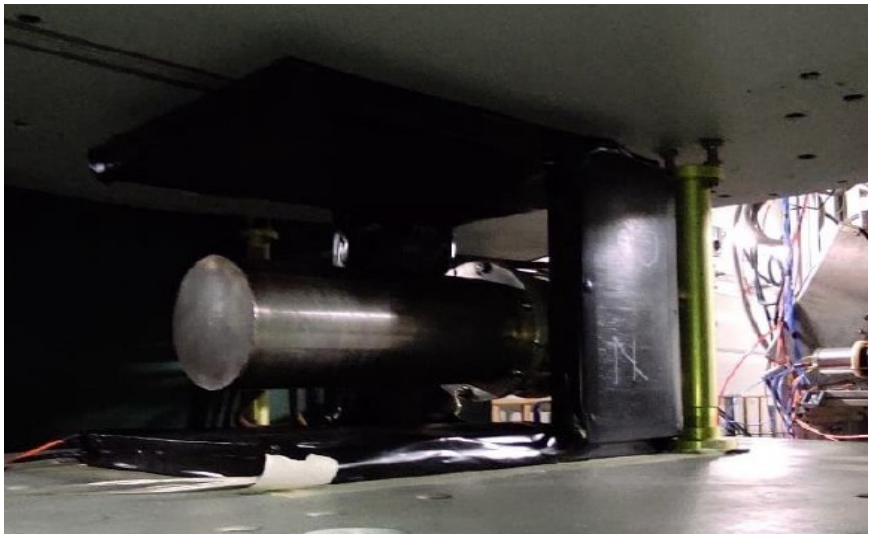


Рис. 3. Реальный вид на детектор и мишени

Литература

1. *Frankfurt L. L., Strikman M. I.* High-energy phenomena, short-range nuclear structure and QCD // Physics Reports. 1981. V. 76(4). P. 215–347.
2. *Frankfurt L., Strikman M. I.* Hard nuclear processes and microscopic nuclear structure // Physics Reports. 1988. V. 160(5–6). P. 235–427.

3. *Degli Atti C. C.* In-medium short-range dynamics of nucleons: Recent theoretical and experimental advances // Physics Reports. 2015. V. 590. P. 1–85.
4. *Patsyuk M.* [et al.]. Unperturbed inverse kinematics nucleon knockout measurements with a carbon beam // Nature Physics. 2021. V. 17(6). P. 693–699.
5. *Baranov A. G.* [et al.]. Measurement of the Parameters of the Forward Scintillator Wall of the BM@N Experiment // Instruments and Experimental Techniques. 2022. V. 65(1). P. 42–46.

УДК 535.2

Оптическая стабилизация волоконно-оптических усилителей мощности для протяженных линий связи

***Е. Д. Бессонова*[1,2], *А. Ю. Игуменов*[1,3], *С. Н. Лукиных*[4,5], *О. Е. Наний*[1,5], *В. Н. Трещиков*[1,6]**

[1]ООО «Т8»
[2]Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М. А. Бонч-Бруевича
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[4]ООО «Т8 НТЦ»
[5]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[6]Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН (Фрязинский филиал)

В условиях стремительно возрастающих требований к скорости, дальности и безопасности передачи данных, особое место занимают волоконно-оптические линии связи (ВОЛС) со спектральным мультиплексированием (DWDM-системы, Dense Wavelength Division Multiplexing) [1, 2]. DWDM-системы представляют собой сложные комплексы, включающие каналообразующее оборудование (транспондеры и мукспондеры), протяженные оптоволоконные кабели и усилители оптической мощности. Для создания ВОЛС повышенной дальности и пропускной способности необходимы исследования линейных и нелинейных эффектов в оптическом волокне, а также усовершенствование каналообразующего и усилительного оборудования.

Наиболее распространены в современных ВОЛС эрбиевые усилители (Erbium Doped Fiber Amplifer, EDFA). Однако с появлением многоуровневых форматов модуляции с большой спектральной эффективностью возникла потребность в использовании распределенных усилителей на основе вынужденного комбинационного рассеяния света (РспВКРУ) (рамановские усилители, Raman Amplifer Unit, RAU), которые обеспечивают большее отношение сигнал/шум, чем эрбиевые усилители [3, 4]. В ходе эксплуатации ВОЛС количество работающих DWDM-каналов может изменяться в результате планового подключения/отключения каналов или аварий на линии. Изменение числа каналов приводит к изменениям коэффициента усиления (КУ), сопровождающимся нежелательными переходными процессами (флуктуациями мощности) [5]. Поэтому для управления этими вариациями КУ необходима стабилизация усиления [6, 7].

Когда EDFA расположен в пункте обслуживания (LocEDFA), для его стабилизации используется электрическая упреждающая регулировка [8–10]. Для увеличения максимальной длины пролетов и увеличения оптического отношения мощности сигнала к мощности шума совместно с LocEDFA используются усилители с удаленной оптической накачкой (Remote Optically Pumped Amplifier, ROPA), устанавливаемые вне пунктов обслуживания [3, 4, 11–16]. Стабилизация ROPA затруднена, в силу их удаленности от блоков питания и управления, расположенных в пунктах обслуживания. Для таких усилителей используется оптическая стабилизация (ОС) коэффициента усиления, осуществляемая путем создания резонатора на одной из рабочих частот усилителя и достижения в этом резонаторе генерации, которая стабилизирует коэффициент усиления (в англоязычной литературе используется термин All-Optical Gain Clamping (GC)) [17–18]. Возможность использования ОС для стабилизации распределенных ВКР-усилителей исследована значительно меньше. В работе [19] осуществлена ОС в РспВКРУ с использованием линейного резонатора, образованного двумя волоконными брэгговскими решетками (ВБР), но отсутствуют подробные исследования его особенностей, таких как искажение спектра КУ каналом генерации и границы применимости в реальных ВОЛС.

В данной работе проведен ряд исследований систем оптической стабилизации ROPA и распределенного ВКР-усилителя. Оптическая стабилизация основана на создании лазерной генерации на длине волны внутри спектра усиления усилителя путем помещения усилителя в спектрально-селективный линейный резонатор. Показано, что оптическая стабилизация ROPA эффективно подавляет вариации коэффициента усиления рабочих спектральных каналов F-ROPA при изменениях мощности лазера накачки, интегральной мощности входного сигнала, температуры активного волокна. ОС РспВКРУ уменьшает неравномерность

спектра усиленных сигналов. Предложен алгоритм автоподстройки мощности накачки, позволяющий уменьшить перекос спектра КУ каналом генерации и снизить энергопотребление усилителя.

Литература

1. *Akasaka Y.* [et al.]. Hybrid Amplification Approach Towards Wideband Optical Communications // J. Lightwave Technol. 2023. V. 41(3). P. 815–821.
2. *Wang Y.* [et al.]. Ultra-Broadband Bismuth-Doped Fiber Amplifier Covering a 115-nm Bandwidth in the O and E Bands // J. Light Technol. 2021. V. 39(3). P. 795–800.
3. *Конышев В. А.* [et al.]. Тенденции и перспективы развития волоконно-оптических систем передачи информации // Квантовая электроника. 2022. Т. 52(12). С. 1102–1113.
4. *Леонов А. В.* [et al.]. Усилители на основе вынужденного комбинационного рассеяния в оптических системах связи // Прикладная фотоника. 2014. Т. 1(1). С. 27–50.
5. *Sun Y.* [et al.]. Fast power transients in WDM optical networks with cascaded EDFAs // Electron. Lett. 1997. V. 33(4). P. 313–314. DOI: 10.1049/el:19970187.
6. *Bakar A. A. A.* [et al.]. Single-stage gain-clamped L-band EDFA with C-band ASE saturating tone // Laser Physics. 2009. V. 19(5). P. 1026–1029. DOI: 10.1134/S1054660X09050259.
7. *Aozasa S.* [et al.]. Novel Gain Spectrum Control Method Employing Gain Clamping and Pump Power Adjustment in Thulium-Doped Fiber Amplifier // J. Lightwave Technol. 2008. V. 26(10). P. 1274–1281. DOI: 10.1109/JLT.2008.917338.
8. *Vijayakumar N.* [et al.]. A feed forward method for stabilizing the gain and output power of an erbium-doped fiber amplifier // Microwave Opt. Technol. Lett. 2009. V. 51. P. 2156–2160. DOI: 10.1002/mop.24554.
9. *Bianciotto A.* [et al.]. EDFA gain transients: experimental demonstration of a low cost electronic control // IEEE Photonics Technol. Lett. 2003. V. 15. P. 1351–1353. DOI: 10.1109/LPT.2003.818267.
10. *Dung J.-C.* [et al.]. Gain stability in a distributed Raman amplifier for a wavelength-division multiplexing system // Optical Engineering. 2010. V. 49(4): 045003. DOI: 10.1117/1.3386520.
11. *Ahuja B.* [et al.]. Statistical Analysis for Semiconductor Optical Amplifier for 16×10Gbps and 8×10Gbps DWDM Transmission Systems having In-line Compensating Fiber // International Journal of Industrial Electronics and Electrical Engineering (IJIEEE). 2020. V. 7(10). P. 265–272.
12. *Mustafa F. M.* [et al.]. A reduced power budget and enhanced performance in a wdm system: a new fbg apodization function // Opt. Quantum Electron. 2022. V. 54: 471. DOI: 10.1007/s11082-022-03876-5.
13. *Olonkins S.* [et al.]. Investigation of in-line distributed Raman amplifiers with co and counter-propagating pumping schemes // Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS). 2016. P. 3773–3777. DOI: 10.1109/PIERS.2016.7735423.
14. *Zhang, T.* [et al.]. Distributed fiber Raman amplifiers with incoherent pumping // IEEE Photonics Technology Letters. 2005. V. 17(6). P. 1175–1177. DOI: 10.1109/LPT.2005.846479.
15. *Putrina J.* [et al.]. Comparison of discrete and distributed in-line Raman amplifiers in a 16 channel DWDM transmission system // Progress in Electromagnetics Research Symposium - Fall (PIERS - FALL). 2017. P. 236–241. DOI: 10.1109/PIERS-FALL.2017.8293141.
16. *Islam M. N.* Raman Amplifers for Telecommunications 2, Sub-systems and Systems. — New York: Springer, 2007.
17. *Liang T. C.* [et al.]. All-optical gain-clamped L-band erbium-doped fiber amplifier with two feedback-loop lasing wavelengths // Opt. Eng. 2005. V. 44(11): 115001. DOI: 10.1117/1.2127928.
18. *Игуменов А. Ю.* [et al.]. Полностью оптическая стабилизация коэффициента усиления волоконного усилителя с удаленной оптической накачкой // Квантовая электроника. 2023. Т. 53(6). С. 484–489.
19. *Wei H.* [et al.]. Use of Bragg gratings to achieve gain clamping in distributed fiber Raman amplifiers // Proc. SPIE, Optical Fibers and Passive Components. 2004. V. 5279. P. 73–76. DOI: 10.1117/12.521476.

УДК 539.1

Исследование реакции ^{11}B(p,α)αα при энергии протонов 0,15-2,2 МэВ

***А. А. Шуклина*[1,2], *М. И. Бикчурина*[1,2], *Т. А. Быков*[1,2], *Д. А. Касатов*[1,2], *Е. О. Соколова*[1,2], *С. Ю. Таскаев*[1,2]**

[1]Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
[2]Новосибирский государственный университет

Ядерную реакцию ^{11}B+p изучают уже на протяжении более 90 лет с первых работ Олифанта и Резерфорда в 1933 [1], Гилберта и Ди в 1936 [2]. Но данные о сечении реакции, представленные в международной базе данных ядерных реакции IBANDL, существенно разнятся, особенно при низкой энергии протонов до 2,5 МэВ.

При взаимодействии протонов с бором-11 возможны следующие реакции [3]:

$$^{11}B + p \rightarrow {}^{12}C^{*} \rightarrow \alpha + \alpha + \alpha + 8{,}681 \text{ МэВ};$$

$$^{11}B + p \rightarrow {}^{12}C^{*} \rightarrow \alpha_0 + {}^{8}Be + 8{,}587 \text{ МэВ}, \; {}^{8}Be \rightarrow \alpha_{01} + \alpha_{02} + 0{,}094 \text{ МэВ};$$

$$^{11}B + p \rightarrow {}^{12}C^{*} \rightarrow \alpha_1 + {}^{8}Be^{*} + 5{,}557 \text{ МэВ}, \; {}^{8}Be^{*} \rightarrow \alpha_{11} + \alpha_{12} + 3{,}124 \text{ МэВ}.$$

Конечными продуктами реакции ^{11}B+p являются три альфа-частицы, кроме того, при энергии протонов около 600 кэВ сечение реакции резонансно возрастает - это делает реакцию привлекательной для реализации безнейтронной термоядерной энергетики. В отличие от нейтронов, которые образуются в большинстве рассматриваемых для термоядерного синтеза реакций, альфа-частицы не активируют окружающие материалы и снижают требования к биологической защите, быстро тормозятся и выделяют всю энергию в веществе теплоносителя термоядерного реактора [4]. Более того, последние исследования показывают, что использование бора в протонной терапии рака может повысить эффективность локализованного облучения опухоли [5].

Для прояснения того, как протекает реакция необходимо провести эксперименты с толстой борсодержащей мишенью. Чтобы узнать об угловом распределении и измерить дифференциальное сечение реакции, необходимо облучить тонкую борную мишень протонами с энергией 0,15-2,2 МэВ.

Эксперименты проводились на ускорителе-тандеме с вакуумной изоляцией VITA (Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск), позволяющем получать протоны с энергией от 0,15 МэВ до 2,2 МэВ со стабильностью 0,1 % с током от 0,1 мА до 10 мА со стабильностью 0,4 % [6]. Ускоритель оснащен охлаждаемым коллиматором с апертурой 1 мм, который позволяет уменьшить ток в 100 раз. Спектры α-частиц и обратно отраженных протонов измерены кремниевым полупроводниковым детектором ПДПА-1К (Институт физико-технических проблем, Дубна). Чувствительная площадь детектора — 20 мм^2, энергетическое разрешение — 13 кэВ.

Толстая мишень из карбида бора толщиной 4 мм облучена протонами 0,3-2 МэВ с шагом по энергии протонов 100 кэВ и 2-2,15 МэВ с шагом 50 кэВ. Спектры при каждом значении энергии набирались в течение 10 минут под углом 135° относительно направления пролета пучка. Мертвое время детектора — менее 0,04, ток на мишени — менее 1,5 мкА. Численное моделирование в программе SIMNRA version 7.03 помогло интерпретировать полученные спектры.

Результаты экспериментов с толстой мишенью подтвердили, что реакция ^{11}B(p,α)αα протекает в два этапа с образованием промежуточного ядра бериллия-8 и имеет два канала - ^{11}B(p,α_1)^{8}Be* и ^{11}B(p,α_0)^{8}Be с различными сечениями.

Тонкая борная мишень — это 1 мкм бора, напыленного на медную подложку в атмосфере азота магнетронным способом (Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск). Концентрация азота в слое составляет 15,4 %, натурального бора — 84,6 %. Плотность напыленного бора варьируется от 1,4 г/см^3 до 2,1 г/см^3. Мишень облучена протонами 0,15-2,2 МэВ с шагом по энергии протонов 100 кэВ под углами 135° и 168° к направлению движения пучка. Время набора статистики на каждом шаге по энергии — 2 часа, мертвое время детектора — менее 0,04, ток на мишени — менее 1,15 мкА.

Измеренные на тонкой мишени под двумя углами дифференциальные сечения показали, что реакция ^{11}B+p протекает неизотропно. Получение полных сечений каналов ^{11}B(p,α_1)^{8}Be* и ^{11}B(p,α_0)^{8}Be с учетом углового распределения требует дополнительных исследований.

Исследование поддержано Российским Научным Фондом, грант No. 19-72-30005.

Литература

1. *Oliphant M. L. E., Rutherford E.* Experiments on the transmutation of elements by protons // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. 1933. V. 141(843). P. 259–281.
2. *Dee P. I., Gilbert C. W.* The disintegration of Boron into three α-particles // Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences. 1936. V. 154(881). P. 279–296.
3. *Кикоин И. К.* Таблицы физических величин. — М.: Атомиздат, 1976.
4. *Rostoker N., Binderbauer M. W., Monkhorst H. J.* Colliding beam fusion reactor Science. 1997. V. 278(5342). P. 1419–1422.
5. *Cirrone G. A. P.* [et al.]. First experimental proof of Proton Boron Capture Therapy (PBCT) to enhance protontherapy effectiveness Scientific reports. 2018. V. 8(1): 1141.
6. *Taskaev S.* [et al.]. Neutron source based on vacuum insulated tandem accelerator and lithium target // Biology. 2021. V. 10(5): 350.

УДК 53.06, 681.527.7

Генератор случайных чисел на основе шума биполярного транзистора

Д. А. Матюшин, А. М. Лобанов, Д. Р. Тихонов, Г. И. Лапушкин, В. Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время устройства, порождающие случайный набор чисел, находят применение в различных областях, в том числе в криптографии, информационных технологиях, статистической физике, теории управления и прогнозирования, математической статистике, тестировании устройств и алгоритмов, а также в игровой индустрии, лотереях и т.д.

Наиболее востребованными являются генераторы неповторяющихся последовательностей случайных чисел, для обозначения которых в англоязычной литературе используется устоявшийся термин *true random number generators (TRNG)* [1]. В большинстве случаев отличительная особенность таких генераторов случайных чисел (ГСЧ) состоит в наличии в их составе источника аналогового шума.

В качестве одного из вариантов реализации источника шума может использоваться эмиттерный p-n переход биполярного транзистора в условиях обратного смещения [3]. В данной работе рассматриваются характеристики генерации случайных чисел, основанной на шуме такого перехода. Опыт показал, что не все транзисторы обеспечивают необходимый для генерации случайных чисел уровень шума, поэтому с целью отбора наиболее подходящих экземпляров была разработана установка для тестирования шумовых характеристик транзисторов. Ее структурная схема приведена на рис. 1. Установка позволяет в автоматизированном режиме осуществлять подбор экземпляров, пригодных для создания ГСЧ, а также автоматически настраивать необходимое для генерации случайных чисел напряжение на эмиттерном переходе транзистора.

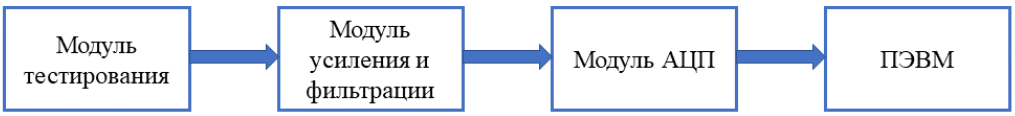


Рис. 1. Структурная схема установки отбора транзисторов для ГСЧ

Анализ особенностей отобранных для ГСЧ транзисторов показал, что в большинстве случаев для них характерен пониженный ток обратимого пробоя в сочетании с наличием в кремниевых пластинах повышенной концентрации дефектов структуры. Зачастую эти дефекты имеют округлую форму с диаметром порядка десятков микрон.

Для отдельных экземпляров транзисторов в предпробойном режиме амплитуда шумов на эмиттере может достигать 15 мВ и более (рис. 2).

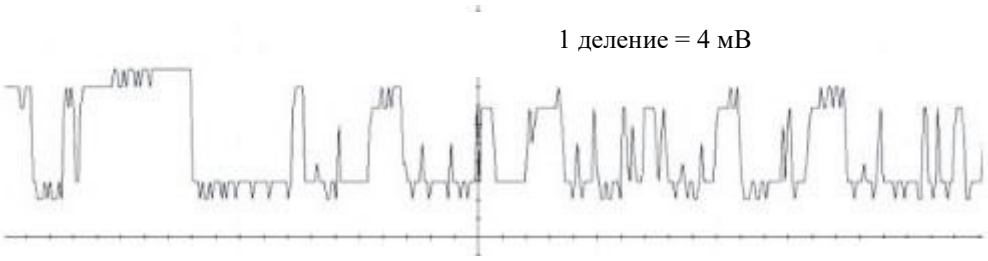


Рис. 2. Осциллограмма коллекторных шумов транзистора

После усиления и фильтрации шумовой сигнал подвергается оцифровке и подается в ПЭВМ для дальнейшего анализа. Далее на основании оцифрованного шума формируется последовательность из нулей и единиц. Алгоритм формирования последовательности представлен на рис. 3: проводится значение «компаратора» на уровне середины амплитуды всплеска, с некоторой частотой дискретизации считывается уровень сигнала, если считанное значение превосходит компаратор, в последовательность добавляется «1», иначе — «0».

Для практического выявления степени близости анализируемой последовательности к случайной разработано большое количество специализированных статистических тестов. NIST (National Institute of Standarts and Technology, американский национальный институт стандартизации и технологий)

разработал пакет статистических тестов [2], ставший в большинстве случаев обязательным элементом проверки последовательности чисел на случайность. Данный набор тестов выявляет истинность нулевой гипотезы, в соответствии с которой тестируемая последовательность является случайной. Для каждого теста вычисляется значение P - вероятность того, что идеальный генератор случайных чисел произвел бы последовательность менее случайную, чем та, которая подвергается тестированию. Если вычисленное значение $P \geq 0.01$, то нулевая гипотеза принимается, т.е. последовательность можно считать случайной (в соответствии с конкретным тестом, для которого это значение P было вычислено).

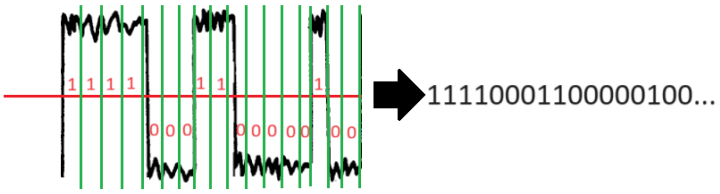


Рис 3. Схема формирования последовательности

Результаты проверки одной из сгенерированных последовательностей с использованием пакета программ NIST приведены на диаграмме (рис. 4).

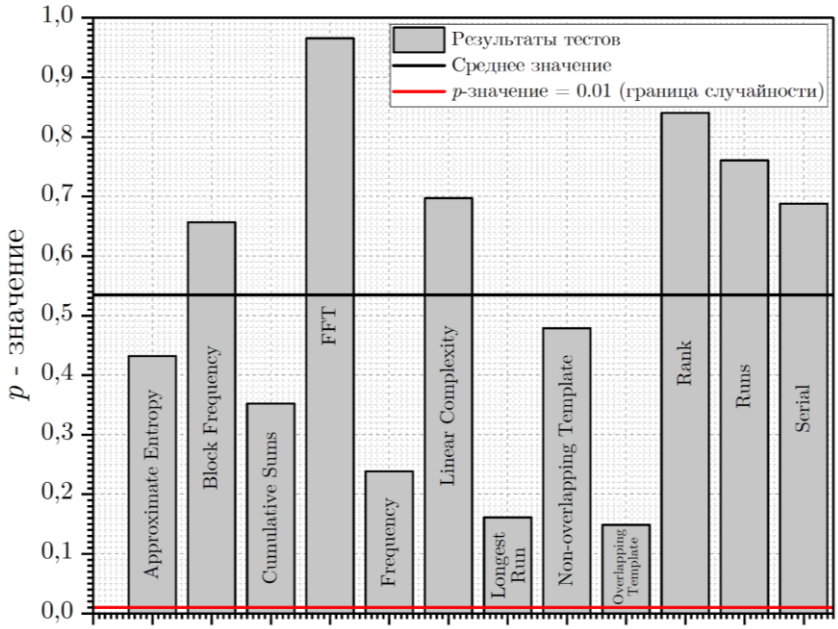


Рис. 4. Диаграмма результатов тестов NIST

Для приведенного примера получено, что минимальное значение $P_{min} = 0{,}148$, максимальное $P_{max} = 0{,}965$. Среднее значение $P_{\text{ср}} = 0{,}535$ превышает пороговое значение 0,01, что соответствует истинности нулевой гипотезы, то есть последовательность является случайной.

В рамках данной работы были проведены эксперименты по изучению особенностей функционирования ГСЧ в различных температурных условиях, в ходе которых определена тенденция к повышению меры случайности генерируемых последовательностей с увеличением температуры. Были проведены исследования по определению усредненного температурного диапазона устойчивого функционирования ГСЧ описанного типа, который составляет в среднем от -35^0C до 80^0C. Было установлено, что в области повышенных температур наблюдается резкое снижение P-значения тестируемых последовательностей вплоть до полного отказа от признания последовательности случайной.

Литература

1. *Herrero-Collantes M., Garcia Escartin J. C.* Quantum random number generators // Rev. Mod. Phys. V. 89(1): 015004.
2. Национальный институт стандартов и технологий. Генерация случайных чисел. URL: https://csrc.nist.gov/projects/random-bit-generation/documentation-and-software (дата обращения: 07.05.2024).
3. *Холлер Е. Вольф Д.* Бистабильные флуктуации тока в обратно-смещенных p-n переходах германия // Journal of applied physics. 1967. V. 38. P. 189–192.

УДК 535.92

Автоматический анализ физических явлений на рефлектограммах многокилометровых оптоволоконных сетей

***В. С. Вазюля*[1], *А. Ю. Игуменов*[1,2], *Е. В. Сметанина*[1], *Т. П. Шувайникова*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ООО «Т8»

Система автоматического тестирования необходима для снижения затрат и повышения надежности технического обслуживания в оптических сетях передачи данных, где безопасность, скорость и дальность играют ключевую роль. Оптический рефлектометр во временной области (The Optical time domain reflectometer, OTDR) является основным испытательным оборудованием, поскольку он измеряет потери в соединениях кабелей и обнаруживает неисправности без разрыва волокон. Поэтому данный прибор особенно удобен для определения событий на длинных линиях оптоволокон, к которым нет прямого доступа, таких как те, что расположены под землей или в воде. Автоматическая оценка характеристик оптических линий с помощью OTDR позволяют операторам быстро выявлять и исправлять проблемы на линии, обеспечивая бесперебойную передачу данных.

Рефлектограмма представляет собой графическое изображение зависимости затухания зондирующего импульса от расстояния трассы, включая отражающие и неотражающие события на оптоволоконной линии. Отражающие события вызваны коннекторами или иными дефектами, из-за которых возникает обратное отражение, проявляющееся на рефлектограмме в виде пика. Примерами неотражающих событий являются изгибы и сварки оптических волокон. Конец линии на рефлектограмме является событием, за которым следуют собственные шумы прибора. Также из рефлектограммы можно получить ослабление излучения на единицу длины (дБ/км), называемое погонным затуханием, зависящее от длины волны зондирующего импульса и типа волокна.

На данный момент активно создаются системы поиска и анализа событий на трассах OTDR. В главе книги [3] описаны основные трудности разработки и критерии, которым должна соответствовать программа. В статье [4] предложен метод получения бесшумной рефлектограммы с помощью линеаризованного метода Брегмана (Linearized Bregman Iterations). Этот метод дает возможность анализировать основные источники шума, влияющие на поток данных, восстановить профили реальных волокон. Существует автоматическая система тестирования волоконных линий [5], в основе которой используется алгоритм нахождения оптимального ослабления чувствительности детектора OTDR путем измерения пикового значения отражений Френеля от коннекторов на трассах дифференциальным методом. Программный модуль нейронных сетей используется для точного определения отражения Френеля на конце кабеля. Для обнаружения пробоя оптического волокна, как локализованного события на линии, существует программа [6], в основе которой лежит интегральное вейвлет-преобразование (wavelet transform). Такой алгоритм имеет преимущества в обнаружении единичных сигналов и их фильтрации для мониторинга обрыва оптического волокна, что обеспечивает точность исследования при сильном шуме. Среди существующих решений проблемы автоматического обнаружения оптических событий на трассе есть одномерная нейросеть [7], способная идентифицировать не только определенный вид событий, но и неизвестные события, а именно события, не представленые в обучающих данных, но указывающие на редкие и непредвиденные ситуации, о которых необходимо сообщать.

В данной работе на основе экспериментальных данных создана программа, которая автоматически определяет следующие характеристики ВОЛС: конец линии, количество катушек и координаты их соединения, погонные потери волокна, потери на коннекторах. Программа указывает на предположительный тип волокна, на основе табличных значений погонного затухания. Принцип работы основан на подсчете дискретной производной сигнала, на основе которой определяются локальные максимумы, то есть те участки, где преобладало обратное рассеяние. Данные о катушках вычисляются на основе линейной аппроксимации соответствующих участков рефлекограммы. Для определения конца линии сравнивается 50 последних значений шума рефлектограммы со средними значениями шума на исследуемых участках. Однако, несмотря на все эти возможности, программа не может точно определить положение изгиба и ширину мертвых зон. Тем не менее, она может предоставить достаточно информации для проведения анализа и выявления проблемных участков линии.

Работа выполнена при поддержке кафедры общей физики МФТИ.

Литература

1. *Листвин А. В., Листвин В. Н., Швырков Д. В.* Оптические волокна для линий связи — М.: Вэлком, 2002.
2. *Игуменов А. Ю., Лукиных С. Н., Мельников И. В.* Физические основы организации и диагностики волоконно-оптических линий связи — М.: МФТИ, 2022
3. *Anderson D. R., Johnson L., Bell F. G.* Automatic event-marking algorithms and calibration // Troubleshooting Optical-Fiber Networks. Chapter 11. — Elsevier, 2004. P. 291–328/
4. *Lunglmayr M., Amaral G. C.* Linearized Bregman Iterations for Automatic Optical Fiber Fault Analysis // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. December 2018. DOI: 10.1109/TIM.2018.2882258.
5. *Tomita N., Enomoto Y.* Automatic and optimum sensing of Fresnel reflections in optical fiber systems with connectors using OTDR // Proc. SPIE 2594. Self-Calibrated Intelligent Optical Sensors and Systems.1996. DOI: 10.1117/12.229239.
6. *Chaoju H., Jun L.* The Application of Wavelet Transform In Analysis of OTDR Curve // Second International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics. 2010. DOI 10.1109/IHMSC.2010.154.
7. *Rizzo A. M.* [et al.]. Known and unknown event detection in OTDR traces by deep learning networks // Neural Computing and Applications. 2022. DOI: 10.1007/s00521-022-07634-2.

УДК 536.421.48

Способ определения усредненных дебаевских параметров материалов в широких температурных интервалах

И. В. Голышев, М. А. Егиян, В. Е. Ивашев, Г. И. Лапушкин, В. Ю. Стожков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В ходе проведения оригинального эксперимента по косвенному измерению количеств теплоты, получаемых телом, изменяющим свою температуру в заданном достаточно широком интервале, сравнения результатов эксперимента с расчетными данными, полученными на основании модели Дебая, обнаружено, что экспериментальные значения полученной телом при нагревании теплоты отличаются от расчетных значений вне пределов погрешностей измерений. Так как дебаевская температура среды существенно зависит от диапазона температур [2, 3], в котором происходит изменение внутренней энергии, то методика, используемая в эксперименте, позволяет методом подбора определять значение эффективной величины параметра Дебая для заданного температурного диапазона.

Для измерения теплоты, полученной твердым телом при нагревании в диапазоне температур от $T_{нач}$ до $T_{кон}$, использовались шарообразные тело из цинка с чистотой 99,9% массой $m_{ш}$=320,2 г и шар массой $m_{ш}$=529,2 г, сделанный из стали Р9 с содержанием хрома до 4,4% масс. Температура шаров измерялась медно-константановыми термопарами, введенными в центры шаров. Масса цинкового шара с подвесом и спаем термопары равна $m_{ш+подв.}$=321,4 г., масса стального шара с подвесом и спаем термопары равна $m_{ш+подв.} = 532{,}3 \pm 0{,}1$ г. Шар подвешивался на штативе и охлаждался до температур жидкого азота, -60°С и -80°С. Температура в центре шара контролировалась термопарой, реперный спай которой помещался в льдо-водяную смесь, температура реперного спая контролировалась ртутным термометром. Охлаждение шара считалось оконченным, когда показания ЭДС термопары стабилизировались в пределах погрешности менее 5–6 мкВ. После охлаждения шара последний быстро помещался в пенопластовый термостат с дистиллированной водой, находившейся при температуре 0°С. Изменения температуры шара в термостате контролировалось термопарой. Время после помещения шара в термостат засекалось при помощи секундомера. Когда значения термоЭДС становились менее 3–4 мкВ, при помощи секундомера определялось время установления теплового равновесия в термостате $\tau_{уст}$, шар извлекался из термостата и взвешивался на весах ВЛТЭ-5100. Таким образом определялась масса льда, намерзшего на шаре за время $\tau_{уст}$. Так как температура воды в ходе эксперимента не менялась (0°С) и не менялась геометрия установки, то можно считать, что тепловой поток, поступающий в термостат снаружи, постоянен в течение всего времени эксперимента. Это позволило провести косвенное измерение количества теплоты, поступающее в термостат за время $\tau_{уст}$, путем измерения массы льда, намерзшего на шаре за время нахождения шара в термостате, равное $2\tau_{уст}$. $\Delta Q_{внеш} = J \cdot \tau_{уст} = \left(m_{льда}(\tau_{уст}) - m_{льда}(2\tau_{уст})\right) \cdot \lambda = J \cdot \tau_{уст}$, где J — тепловой поток, поступающий в термостат извне (Дж/с); $\Delta Q_{внеш}$ — суммарное количество теплоты, поступившее в термостат извне за время $\tau_{уст}$; λ=334 Дж/г — удельная теплота плавления воды [1].

При предварительных измерениях было установлено, что время установления теплового равновесия после помещения стального шара в термостат $\tau_{уст}$ составляет 22±0,5 мин (77К), для цинкового шара — 6±0,5 мин (–60 °С), 14±0,5 мин (77К). При этом случайная погрешность ЭДС термопары не превышала

±5 мкВ, что соответствует для медно константановой термопары ±0,12°С. Количество теплоты, выделившееся при образовании льда за время $\tau_{уст}$ и полученное шаром, рассчитывалось как $\Delta Q_p(\tau_{уст}) = m_{льда}(\tau_{уст}) \cdot \lambda$. Суммарное количество теплоты, полученное шаром в эксперименте, принималось равным $\Delta Q_p + \Delta Q_{внеш}$. Данные по низкотемпературному пределу температуры Дебая Θ_{LL} получены из [3], значения при комнатной температуре Θ_{RT} — из [2].

Результаты основной серии экспериментов приведены в табл. 1.

Для расчета количества теплоты в рамках модели Дебая, получаемого шаром при изменении его температуры от $T_{нач}$ до $T_{кон}$, проводились в программе Wolfram Alpha по следующей формуле:

$$\Delta Q_Д = 9Rv_ш\left(T_2\left(\frac{T_{кон}}{\Theta_Д}\right)^3\int_0^{\frac{\Theta_Д}{T_{кон}}}\frac{x^3}{e^x-1}dx - T_1\left(\frac{T_{нач}}{\Theta_Д}\right)^3\int_0^{\frac{\Theta_Д}{T_{нач}}}\frac{x^3}{e^x-1}dx\right). \quad (1)$$

Расчетные значения теплот при значении Дебаевского параметра как Θ_{LL}, так и Θ_{RT}, для обоих шаров отличаются от экспериментальных более, чем на 19%, что изначально привело к заключению, что при шоковом охлаждении воды происходит переохлаждение воды вплоть до линии Видома (рис.1) (при атмосферном давлении T_v = 231K), далее образуется в кубической модификации I_c без образования гексагональной структуры льда I_g, а при охлаждении до азотных температур образуется аморфная модификация льда — А-лед. Это предположение было отвергнуто в связи с замкнутым циклом движения рассматриваемой термодинамической системы в фазовом пространстве и любые температурные зависимости суммарных энтальпий исследуемых процессов нарушали бы закон Гесса.

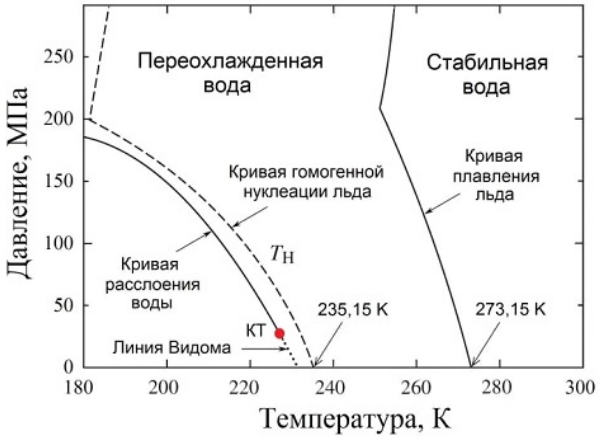


Рис. 1. Фазовая диаграмма переохлажденной объемной воды в переменных давление — температура [4]. Штриховая линия — предел возможного переохлаждения. КТ — вторая критическая точка воды

По результатам измерений в программе Wolfram Alpha методом подбора получены эффективные значения дебаевских параметров для обоих материалов в исследуемых диапазонах температур. Эти расчетные величины приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты проведенных измерений

Материал	Масса, г	$T_{нач}$, К	Масса льда, г	ΔQ_p, Дж	$\Delta Q_{внеш}$, Дж	Θ_{LL}, K	Θ_{RT}, K	$\Theta_{эфф}, K$
Сталь Р9	532,3±0,1	77,2±0,02	105,8±0,2	35337±67	2651±121	477	373	420
Цинк	321,4±0,1	77,2±0,02	47,8±0,2	15965±52	1534±96	329	237	301
Цинк	321,4±0,1	195±0,02	23,1±0,2	7715±29	668±23	329	237	277

Таким образом, следует заключить, что распределение фононов по энергии должно отличаться от планковского в связи с макродефектами используемых образцов и/ или наличием примесей (в шаре из стали Р9), то есть исследуемые тела имеют поликристаллическую структуру с сильно различающимися размерами кристаллов. Это может подавлять некоторые части длинноволнового спектра фононов.

Литература

1. Лабораторный практикум по общей физике. Квантовая физика / под ред. Ю. М. Ципенюка. — М.: Физматкнига, 2012.

2. *Ho C. Y., Powell R. W., Liley P. E.* Thermal Conductivity of the Elements // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1972. V. 1(2). P. 279–421.
3. *Stewart G. R.* Measurement of Low-Temperature Specific Heat // Review of Scientific Instruments. 1983. V. 54(4). P. 1–11.
4. *Невзоров А. Н.* Свойства метастабильных форм воды: новая интерпретация эксперимента // Мир измерений, 2009. № 8. С. 38–45.

Секция теоретической физики

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

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

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

Дата: 03–04.04.2024 Время: 11:00

УДК 530.21

Взаимодействие топологических солитонов в скалярных теориях с полиномиальным самодействием

***А. А. Мальнев*[1], *Т. В. Гани*[2], *П. А. Блинов*[1]**

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

Солитонные конфигурации являются важными решениями полевых уравнений в классической и квантовой теориях поля, имеющими приложения во многих областях физики от конденсированных сред до космологии [1, 2]. В последнее время возрос интерес к исследованию взаимодействий между солитонами, в частности между кинком и антикинком. Ведутся работы по изучению столкновений нескольких кинками [3], исследованию роли квазинормальных мод в столкновениях кинк-антикинк [4] и др. Настоящая работа посвящена изучению взаимодействия между кинком и антикинком в случае перекрытия степенный хвостов. В данном случае возникает дальнодействие между кинком и антикинком.

Рассмотрена лоренц-инвариантная теоретико-полевая модель с одним действительным скалярным полем $\varphi = \varphi(x,t)$ в (1+1) измерениях, заданная лагранжианом

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 - V(\varphi) \quad (1)$$

с потенциалом

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}(1+\varphi)^2(1-\varphi)^{2n}, n \in \mathbb{N}. \quad (2)$$

Для этого потенциала ранее мы нашли топологический солитон [5], соединяющий вакуумы модели $\varphi_{vac} = \pm 1$ (см. рис. 1):

$$x - x_0 = \frac{1}{2^n}\ln\left(\frac{1+\varphi}{1-\varphi}\right) + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{1}{j\cdot 2^{n-j}}\frac{1}{(1-\varphi)^j}. \quad (3)$$

Кинк (3) имеет слева экспоненциальную, а справа степенную асимптотику:

$$\varphi_s(x) \approx \begin{cases} -1 + 2\exp\left[2^n\left(x - x_0\right)\right] \text{ при } x \to -\infty, \\ 1 - \frac{[2(n-1)]^{1/(1-n)}}{\left(x-x_0\right)^{1/(n-1)}} \text{ при } x \to +\infty. \end{cases} \quad (4)$$

Для вычисления силы взаимодействия рассмотрим статические кинк и антикинк, расположенные в точках $x = -A$ и $x = A$ соответственно, где $A \gg 1$. Аппроксимируем следующим образом: при $x \le -A/2$ и $x \ge A/2$ поле будет задаваться точными кинковым и антикинковым решениями соответственно. При $-A/2 \le x \le A/2$ аппроксимируем поле квадратичной функцией $\varphi_{quad} = \alpha x^2 + \beta$ и гладко сшиваем (рис. 2).

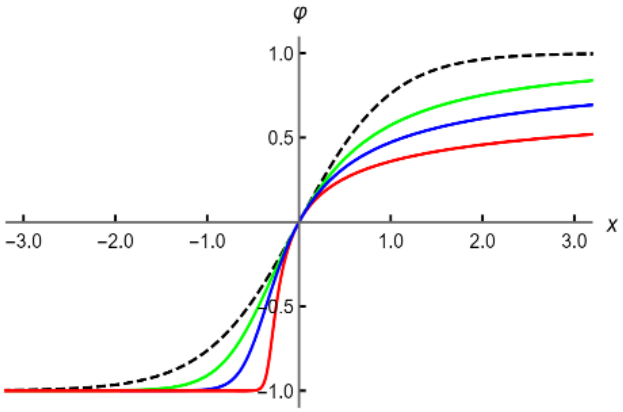


Рис. 1. График топологических солитонов (штриховой линией на всех графиках показан солитон модели φ^4, соответствующий n=1): в порядке удаления от штриховой кривой идут n = 2, 3, 5

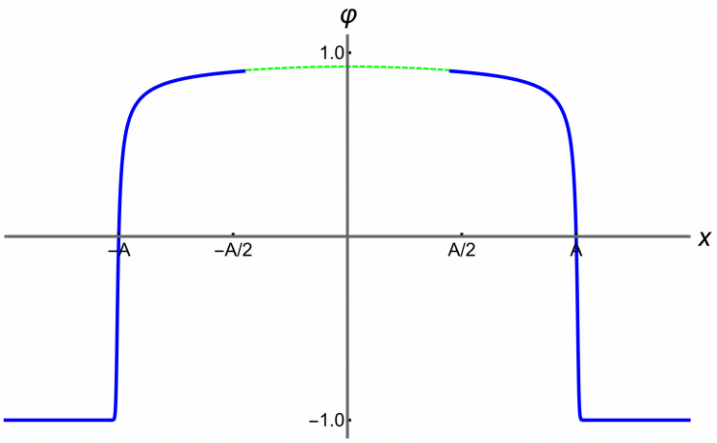


Рис. 2. График аппроксимации кинка и антикинка квадратичной склейкой для случая n = 3, A = 50

Энергию системы кинк-антикинк вычислим по формуле

$$E[\varphi] = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 + V(\varphi)\right] dx.$$

Разобьем полную энергию данной конфигурации на части согласно нашему построению:

$$E(A) = E_{\text{quad}}(A) + 2\left[E_{\text{K}} - E_{\text{tail}}(A)\right] \tag{5}$$

где $E_{\text{quad}}(A)$ — энергия квадратичной склейки,$[E_{\text{K}} - E_{\text{tail}}(A)]$ — энергия кинка(антикинка) без хвоста. Тогда сила, действующая на кинк (антикинк) может быть оценена как

$$F(A) = -\frac{\partial E}{\partial(2A)} = -\frac{1}{2}\frac{\partial E_{\text{quad}}}{\partial A} + \frac{\partial E_{\text{tail}}}{\partial A}, \tag{6}$$

Получим силу:

$$F(A) = \frac{1}{2}\cdot\frac{n+1}{n-1}\cdot\left[\varepsilon(n) - \frac{4}{n+1}(n-1)^{(n+1)/(1-n)}\right]\cdot\frac{1}{A^{2n/(n-1)}}, \tag{7}$$

где

$$\varepsilon(n) = \frac{2}{3}(n-1)^{2n/(1-n)} + 2\left[(n-1)^{1/(1-n)} - \frac{1}{2}(n-1)^{n/(1-n)}\right]^{2n}\sum_{k=0}^{2n}\frac{C_{2n}^{k}}{(2k+1)(2n-3)^{k}}. \tag{8}$$

При $n = 2$ эта формула дает

$$\mathrm{F(A)} \approx -\frac{0.21}{\mathrm{A}^4},$$

а при n = 3 получаем

$$F(A) \approx -\frac{0.072}{A^3}.$$

Сила отрицательна, что означает притяжение между кинком и антикинком.

Полученная оценка силы взаимодействия сравнивалась с результатами работ [6, 7], где проводились расчеты сил в моделях с похожими потенциалами. Сравнение показало хорошее согласие.

Литература

1. *Manton N., Sutcliffe P.* Topological Solitons — Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
2. *Vilenkin A., Shellard E. P. S.* Cosmic strings and other topological defects. — Cambridge U.K.: Cambridge University Press, 1994.
3. *Moradi Marjaneh A.* [et al.] Multi-kink collisions in the ϕ^6 model // Journal of High Energy Physics. 2017. V. 2017(7). P. 1–22.
4. *Campos J. R.* [et al.] Solid lipid nanoparticles (SLN): prediction of toxicity, metabolism, fate and physicochemical properties // Nanopharmaceuticals. 2020. P. 1–15.
5. *Blinov P. A.* [et al.] Kinks in higher-order polynomial models // Chaos, Solitons & Fractals. 2022. V. 165: 112805.
6. *Christov I. C.* [et al.] Kink-kink and kink-antikink interactions with long-range tails // Physical review letters. 2019. V. 122(17): 171601.
7. *Manton N. S.* Forces between kinks and antikinks with long-range tails // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2019. V. 52(6): 065401.

УДК авторами не указан

Диаграммная техника Келдыша в фазовом пространстве

***А. Г. Михайленко*[1], *А. Г. Семенов*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[3]Сколковский институт науки и технологий

Диаграммная техника Келдыша позволяет находить нестационарные функции Грина и описывать динамику наблюдаемых величин в реальном времени [1]. В данной работе мы обобщаем диаграммную технику Келдыша на системы, взаимодействие которых содержит произведение координаты и импульса. К системам с таким типом взаимодействия относятся, в частности, поле Янга-Миллса в кулоновской калибровке [2] и частица с зависящей от координаты массой [3].

Одним из принципиальных вопросов, возникающих при описании подобных систем, является вопрос об упорядочении операторов в гамильтониане. Чтобы не ограничиваться конкретным выбором упорядочения, мы используем понятие символа Вейля и другие методы, аналогичные тем, которые применяются при вигнеровской формулировке квантовой механики в фазовом пространстве [4].

Мы формулируем эволюцию на контуре Келдыша в терминах интеграла по траекториям в фазовом пространстве и рассматриваем специфические особенности диаграммной техники для интересующего нас вида взаимодействия. В частности, мы показываем, что из-за сокращения некоторых петель вид диаграмм принципиально не отличается от случая взаимодействия, зависящего только от координаты. Все отличие сводится лишь к увеличению числа диаграмм.

Построение интеграла по траекториям как предела дискретного выражения делает возможным строго вывести классическое статистическое приближение, которое позволяет выразить динамику средних значений наблюдаемых через решения классических уравнений движения и усреднение по начальным условиям [5].

Наконец, мы показываем, что влияние начального состояния системы на динамику наблюдаемых можно представить в виде внешних источников, действующих в начальный момент времени. Эти источники выражаются через кумулянты функции Вигнера начального состояния. Такое представление позволяет увидеть, каким образом негауссовы начальные условия модифицируют диаграммную технику Келдыша.

Литература

1. *Radovskaya A. A., Semenov A. G.* Semiclassical approximation meets Keldysh–Schwinger diagrammatic technique: Scalar φ^4 // The European Physical Journal C. 2021. V. 81(8):704.
2. *Гитман Д. М., Тютин И. В.* Каноническое квантование полей со связями. — М.: Наука, 1986.
3. *y Cruz S. C., Negro J., Nieto L. M.* Classical and quantum position-dependent mass harmonic oscillators // Physics Letters A. 2007. V. 369(5-6). P. 400-406.

4. *Hillery M.* [et al.]. Distribution functions in physics: Fundamentals // Physics reports. 1984. V. 106(3). P. 121-167.
5. *Leonidov A. V., Radovskaya A. A.* On the formation of the equation of state of an evolving quantum field // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101. № 4. С. 215–220.

УДК 530.1

О значимости квантовых поправок в расширяющихся вселенных

***Э. Т. Ахмедов*[1,2], *А. В. Анохин*[1,2], *К. А. Казарновский*[1]**

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

Один из самых важных вопросов современной космологии состоит в описании набора свойств ранней Вселенной. Под этими свойствами мы имеем в виду геометрию исходной поверхности Коши, моды, начальное состояние квантовых полей в пространстве Фока и т. д. Для ответа на поставленный вопрос сейчас, когда нет никакой возможности осуществить экспериментальную проверку, необходимо рассмотреть как можно более общие начальные условия и пронаблюдать последствия их эволюции во время и после первоначального быстрого расширения Вселенной.

Со времен оригинальных работ [1–5] общепринято считать, что в масштабе инфляции все остальные поля, кроме классического гравитационного фона, несмотря на квантовую природу, следует учитывать на древесном уровне. Предполагается, что петлевые эффекты приводят лишь к перенормировке констант связи, масс и других параметров теории, в то время как древесное математическое среднее тензора энергии-импульса полей материи кардинально не меняется. Однако есть существенные доказательства того, что квантовой поправки в нестационарных ситуациях могут играть решающую роль. Исследуемая нами модель демонстрирует именно такие свойства.

Мы рассматриваем действительное скалярное поле с действием:

$$S^{free}[\phi] \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d^D x \mathcal{L}[\phi, g] = \int_{-\infty}^{+\infty} d^D x \sqrt{|g|} \left(\frac{g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi}{2} - \frac{m^2\phi^2}{2} - \frac{\lambda}{b!}\phi^b \right).$$

Фоновая метрика имеет вид

$$ds^2 = C(t)(dt^2 - d\vec{\boldsymbol{x}}^2), \text{ где } C(t) = A + Be^{\rho t},\ \{A, B\} \in R^+, \rho > 0.$$

Отметим, что линейный сдвиг координат и параметров $t \to \frac{t}{\sqrt{A}} + \frac{ln\left(\frac{A}{B}\right)}{\rho}$, $\vec{\boldsymbol{x}} \to \frac{\vec{\boldsymbol{x}}}{\sqrt{A}}$, $\rho \to \rho\sqrt{A}$, а также переход к конформному времени $\tau = \frac{2}{\rho} e^{\frac{\rho t}{2}}$ асимптотически на больших временах приводит к метрике FLRW:

$$ds^2 \approx d\tau^2 - \frac{\rho^2\tau^2}{4} d\vec{\boldsymbol{x}}^2, \text{ при } \tau \to +\infty.$$

Уравнение движения $\partial_\mu\left(g^{\mu\nu}\partial_\nu\phi\sqrt{g}\right) + \sqrt{g}m^2\phi = 0$ при помощи стандартного разложения по модам $\phi_{\vec{\boldsymbol{k}}}(t, \vec{\boldsymbol{x}}) = f_k(t)e^{i\vec{\boldsymbol{k}}\vec{\boldsymbol{x}}}$ для случая безмассового поля $\mathrm{m} = 0$ может быть сведено к ODE гипергеометрического типа. С учетом обозначений $K^2 = \frac{k^2}{\rho^2}, d \equiv \frac{D-2}{4}$, его общее решение имеет вид:

$$f_k(t) = C_1 e_2^{-ikt} F_1\left(d - iK - i\sqrt{K^2 - d^2}; d - iK + i\sqrt{K^2 - d^2}; 1 - 2iK; -e^{\rho t}\right) +$$

$$+C_2 e_2^{ikt} F_1\left(d + iK - i\sqrt{K^2 - d^2}; d + iK + i\sqrt{K^2 - d^2}; 1 + 2iK; -e^{\rho t}\right), \text{ при } K > d.$$

Для получения плоских волн на $\mathrm{t} = -\infty$ (in-моды) нам следует положить $C_2 = 0$. После этого в терминах вторичного квантования имеем:

$$\phi(t, \vec{\boldsymbol{x}}) \equiv \int \frac{d^{D-1}\vec{\boldsymbol{k}}}{(2\pi)^{D-1}} \left(\mathrm{a}_{\vec{\boldsymbol{k}}}^{+} f_k^{in^*}(t) e^{-i\vec{\boldsymbol{k}}\vec{\boldsymbol{x}}} + a_{\vec{\boldsymbol{k}}} f_k^{in}(t) e^{i\vec{\boldsymbol{k}}\vec{\boldsymbol{x}}} \right).$$

Стандартные коммутационные соотношения приводят к фиксации константы $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2k}}$. Из выражения для пропагатора Келдыша

$$G^K(t, \vec{\boldsymbol{x}}, t', \vec{\boldsymbol{x}}') \equiv \frac{1}{2}\langle\{\phi(t, \vec{\boldsymbol{x}}), \phi(t', \vec{\boldsymbol{x}}')\}\rangle$$

в совокупности с выбором пространственно однородного состояния $\left\langle a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{p}} \right\rangle = n_k \delta(\vec{k} - \vec{p}), \langle a_{\vec{k}} a_{\vec{p}} \rangle = \kappa_k \delta(\vec{k} + \vec{p}), \left\langle a_{\vec{k}}^{+} a_{\vec{p}}^{+} \right\rangle = \kappa_k^{*} \delta(\vec{k} + \vec{p})$ при помощи диаграммной техники Келдыша–Швингера (рис. 1) можно получить поправку к числу заполнения в одной петле для кубического самодействия:

$$n_k^{(2)}(T_0) \approx \frac{\lambda^2}{2} \int_{t_0}^{T_0} \mathrm{d}y^0 \, dz^0 \sqrt{g(y^0) g(z^0)} \int \frac{d^{D-1}\vec{p}}{(2\pi)^{D-1}} \frac{d^{D-1}\vec{s}}{(2\pi)^{D-1}} \delta(\vec{k} - \vec{p} - \vec{s}) f_k^{in^*}(y^0) f_k^{in}(z^0)$$

$$\times \{ f_p^{in^*}(y^0) f_p^{in}(z^0) f_s^{in^*}(y^0) f_s^{in}(z^0) \times \left[(1 + n_k)(1 + n_p)(1 + n_s) - n_k n_p n_s \right] +$$

$$+ 2 f_p^{in^*}(y^0) f_p^{in}(z^0) f_s^{in}(y^0) f_s^{in^*}(z^0) \times \left[(1 + n_k)(1 + n_p) n_s - n_k n_p (1 + n_s) \right] +$$

$$+ f_p^{in}(y^0) f_p^{in^*}(z^0) f_s^{in}(y^0) f_s^{in^*}(z^0) \times \left[(1 + n_k) n_p n_s - n_k (1 + n_p)(1 + n_s) \right] \} + h.c.$$

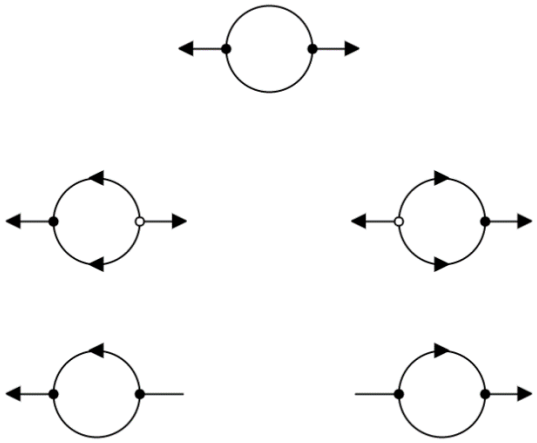


Рис. 1 Диаграммы для кубического взаимодействия

В случае больших внешних импульсов временная зависимость добавки может быть получена для произвольной степени взаимодействия:

$$n_{k \gg \rho d}^{(2)}(T_0) \approx \lambda^2 e^{\rho \left(\frac{2D - b(D-2)}{2} \right) T_0} \Phi\left(\frac{k}{\Lambda} \right).$$

Для внешних импульсов, сравнимых с ρd, ответ для скорости роста дается формулами:

$$n_{k > \rho d,\, p > \rho d,\, s \le \rho d}^{(2)}(T_0) \approx \lambda^2 e^{\rho T_0} \frac{2k}{\omega_k} \int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{(2\pi)^3} \int_0^{s = \rho d} \frac{d^3\vec{s}}{(2\pi)^3} \delta(\vec{k} - \vec{p} - \vec{s}) \frac{1}{s} \frac{|E_1(s)|^2 e^{2\sqrt{\rho^2 d^2 - s^2} T_0}}{\rho + 2\sqrt{\rho^2 d^2 - s^2}} \Phi\left(\frac{k}{\Lambda} \right),$$

$$n_{k \le \rho d,\, p, s \le \rho d}^{(2)}(T_0) \approx \lambda^2 \frac{e^{\rho T_0} e^{2\sqrt{\rho^2 d^2 - k^2} T_0} e^{4\sqrt{\rho^2 d^2 - \frac{k^2}{4}} T_0}}{T_0^{\frac{3}{2}}} \Phi\left(\frac{k}{\Lambda} \right).$$

Зависящий от времени однопетлевой вклад в тензор энергии-импульса (ТЭИ) также можно найти при помощи учета перенормировки G^K:

$$\left\langle T_{\mu\nu}(t) \right\rangle_{1-\mathrm{loop}} \approx \int_{k < \rho d} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} C_1(k) \frac{e^{4\sqrt{\rho^2 d^2 - k^2} t} e^{4\sqrt{\rho^2 d^2 - \frac{k^2}{4}} t}}{t^{\frac{3}{2}}} K_{\mu\nu}.$$

Полученные выражения для однопетлевых перенормировок числа заполнения и ТЭИ явным образом содержат быстро растущие вклады на больших временах, что доказывает изначальное утверждение о необходимости учета обратной реакции полей материи на затравочный гравитационный фон. Также существенно, что временная зависимость получилась именно экспоненциальной, а не линейной, как это обычно наблюдается в схожих задачах.

Литература

1. *Starobinsky A. A.* A new type of isotropic cosmological models without singularity // Physics Letters B. 1980. V. 91. P. 99–102. DOI: 10.1016/0370-2693(80)90670-X.
2. *Starobinsky A. A.* Dynamics of phase transition in the new inflationary universe scenario and generation of perturbations // Physics Letters B. 1982. V. 117. P. 175-178. DOI: 10.1016/0370-2693(82)90541-X.
3. *Linde A. D.* A new inflationary universe scenario: A possible solution of the horizon, flatness, homogeneity, isotropy and primordial monopole problems // Physics Letters B. 1982. V. 108. P. 389-393. DOI: 10.1016/0370-2693(82)91219-9.
4. *Linde A. D.* Chaotic inflation // Physics Letters B. 1983. V. 129. P. 177-181. DOI: 10.1016/0370-2693(83)90837-7.
5. *Guth A. H.* Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems // Physical Review D. 1981. V. 23. P. 347-356. DOI: 10.1103/PhysRevD.23.347.

УДК 530.1

Подавление космологической постоянной в нестационарном скалярном ковариантном состоянии

А. Б. Айнбунд

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Экспериментально установлено, что масштаб энергии, который задает космологическую постоянную или плотность энергии вакуума составляет 10^{-3} эВ согласно данным космологии об эволюции вселенной. Проблема заключается в том, что в теоретических моделях этот масштаб составляет порядка 10^{18} ГэВ. Мы предлагаем модель, которая позволяет описать такое подавление: скалярное поле в конечном объеме в нестационарном когерентном состоянии задает тензор энергии-импульса, в котором вклад состояния с нулевым числом квантов $|0\rangle$ подавлен экспоненциально, если в когерентном состоянии среднее число квантов много больше единицы. Для уравнения состояния $w = \frac{p}{\rho} = -1$ необходимо рассмотреть $4d$-изотропые флуктуации этого поля.

В модели есть два масштаба: планковская энергия и масштаб массы скалярного поля порядка 10^{16} ГэВ. В стационарном вакуумном состоянии возникает плотность энергии порядка$(10^{16}\text{ГэВ})^4$, а в когерентном состоянии эта величина подавлена $e^{-\langle n\rangle} \sim e^{-250}$. Интересно, что такое среднее число квантов задается отношением $\frac{m_{Pl}}{m}$, где m_{Pl} --- энергия этого поля в конечном объеме.

Для начала в работе проводятся вычисления для трехмерного случая, а затем записывается выражение в четырехмерном, где после нескольких подстановок и упрощений получается выражение:

$$\langle \text{vac}|T^{\Lambda}_{\mu\nu}|\text{vac}\rangle = g_{\mu\nu}\left\langle \text{vac}\left|\left(-\frac{1}{4}(\partial_\tau\varphi)^2 + \frac{1}{2}m^2\varphi^2\right)\right|\text{vac}\right\rangle = g_{\mu\nu}\frac{1}{8}m\Lambda^3.$$

Таким образом, ковариантная структура пространства-времени в конечном объеме приводит к тензору энергии-импульса подобному вакууму, по крайней мере, для основного состояния без квантов осциллятора и абсолютного значения плотности энергии:

$$\rho^{vac}_{bare} = \langle \text{vac}|T^{\Lambda}_{00}|\text{vac}\rangle = \frac{1}{8}m\Lambda^3 > 0.$$

Поскольку Вселенная эволюционирует, поэтому естественно изучать нестационарное состояние в модели с конечным объемом. Более того, если состояние возникает в результате возможной флуктуации относительно состояния вакуума, то количество квантов распределяется по Пуассону, в то время как состояние является когерентным. Следовательно, вклад вакуумного состояния в усредненный тензор энергии-импульса подавляется как:

$$\langle T^{\Lambda}_{\mu\nu}\rangle_{\text{vac}} = \langle \text{vac}|T^{\Lambda}_{\mu\nu}|\text{vac}\rangle \cdot e^{-\langle n\rangle} = \rho^{\text{bare}}_{\text{vac}} \cdot e^{-\langle n\rangle} = \frac{1}{8}m\Lambda^3 \cdot e^{-\langle n\rangle},$$

где $\langle n\rangle$ — среднее число квантов в когерентном состоянии.

Таким образом, энергия когерентного состояния в конечном объеме в соответствии с действием задается формулой:

$$\langle E\rangle = \omega_{\text{osc}}\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right) = m\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right),$$

в то время как та же величина в терминах плотности энергии в конечном объеме $V_{[3]}$ равна

$$\langle E\rangle = V_{[3]}\rho_{bare}^{vac}\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)\cdot 2 = V_{[3]}\,\frac{1}{4}\,m\Lambda^3\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right),$$

тогда

$$V_{[3]} = \frac{4}{\Lambda^3}.$$

Предполагая соответствие параметров модели оценкам наблюдательной космологии, мы ставим плотность энергии вакуума и инфляционное плато по порядку равными:

$$\rho_{\text{vac}} \sim (10^{-3\ \text{eV}})^4, \qquad V_C \sim \left(10^{16\ \text{GeV}}\right)^4,$$

тогда $\langle n\rangle \sim 250 \Rightarrow$ энергия начального когерентного состояния в эталонном объеме:

$$\langle E\rangle \sim \langle n\rangle m \sim m_{\text{Pl}}$$

Итак, модель рассматривает два энергетических масштаба, естественно участвующих в согласованной модели инфляции Вселенной: приведенной планковской массой и масштабом инфляционного плато.

Мы показали, что абсолютное значение плотности энергии нулевой точки, вызванное субпланковской шкалой масштаба обрезания, может быть подавлено при следующих условиях:

нестационарное когерентное состояние скалярного поля в расширяющейся Вселенной,

конечный объем, определяемый масштабом обрезания энергии для скалярного поля,

естественные оценки масштаба обрезания по сравнению с планковской энергией скалярного поля в конечном объеме,

как это было получено в ковариантном формализме. Модель включает в себя, по крайней мере, две шкалы энергии:

1. планковскую шкалу гравитации, эта шкала определяет энергию скалярного поля в конечном объеме;

2. субпланковскую обрезание, определяющую масштаб конечного объема, а также массу скалярного поля, флуктуации вакуума и высоту плато потенциала в моделях инфляционного расширения ранней Вселенной, имеющих отношение к высокоточным данным в космологии.

Соотношения между шкалами в том виде, в каком они оцениваются, требуют дальнейших исследований.

Литература

1. *Zeldovich Ya.* The Cosmological constant and the theory of elementary particles // Sov.Phys.Usp. 1968. V.11. P. 381-393.
2. *Weinberg S.* The cosmological constant problem // Rev. Mod. Phys. 1989. V. 61. P. 1-23.
3. *Andrianov A.* [et al.] Symmetries and the cosmological constant puzzle // Phys.Lett. B. 2007. V. 651. P. 306-312.
4. *Akhmedov E. K.* Vacuum energy and relativistic invariance // arXiv preprint. [2020]. arXiv: hep-th/0204048v2.

УДК 530.22

Вильсоновские сети в пространстве AdS и глобальные конформные блоки

***К. Б. Алкалаев*[1], *А. О. Канода*[1,2], *В. С. Хитеев*[1,2]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Существует соответствие между глобальными конформными блоками в двумерной конформной теории поля и матричными элементами вильсоновских сетей, протянутых в пространстве AdS_3, с точками, расположенными на границе [1–3]. На текущий момент рассматривались только матричные элементы с малым числом внешних линий (n = 3, 4, 5) [4, 5]. В силу (анти)голоморфной факторизации трехмерных гравитационных вильсоновских линий и глобальных конформных блоков в CFT_2, соответствие может быть переформулировано для случая AdS_2/CFT_1.

Ключевым объектом для изучения вильсоновских сетей является *o(d, 2)*-связность *A* (*d=1, 2*), используемая для построения операторов вильсоновских линий и удовлетворяющая условию нулевой

кривизны $F(A) = dA + A \wedge A = 0$. Условие нулевой кривизны может быть реализовано динамически при помощи действия Черна–Саймонса или действия BF.

В рамках работы рассматриваются матричные элементы вильсоновских сетей в comb канале вида

$$\left(W_{j_1}[y_1, x_1] I_{j_1 j_2 \tilde{j}_1} W_{j_1}[y_2, y_1] I_{\tilde{j}_1 j_3 \tilde{j}_2} \dots W_{\tilde{j}_{n-3}}[y_{n-2}, y_{n-3}] I_{\tilde{j}_{n-3} j_{n-1} j_n}\right) \times \left(W_{j_2}[x_2, y_1] \dots W_{j_{n-1}}[x_{n-1}, y_{n-2}] W_{j_n}[x_n, y_{n-2}]\right),$$

где $W_{j_i}[y_i, x_i]$ — вильсоновский оператор, построенный по связности A, $I_{j_1 j_2 j_3}$ — сплетающий оператор, проецирующий тензорное произведение двух представлений на третье. Схематически данный объект можно изобразить в виде графа (рис. 1), где ребра графа — это вильсоновские линии, соединяющие внешние и внутренние точки.

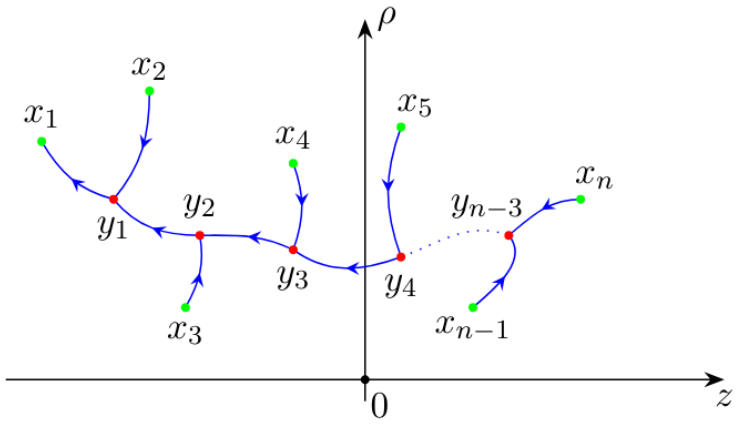


Рис. 1. Вильсоновский матричный элемент в comb канале в виде графа

В работе показано, что из условия инвариантности вильсоновских матричных элементов относительно симметрий пространства AdS_2 следует соотношение между матричными элементами и глобальными конформными блоками в одномерной конформной теории поля. Кроме того, данное условие ограничивает возможный выбор обкладок матричного элемента состояниями Ишибаши.

Явно вычисляя матричные элементы вильсоновских операторов, действующих на состояния Ишибаши, а также используя явные выражения для матричных элементов сплетающих операторов, являющимися коэффициентами Клебша–Гордана, были найдены матричные элементы n-точечных вильсоновских сети в comb канале с внешними точками на конформной границе пространства AdS_2. Полученные выражения связаны с n-точечными глобальными конформными блоками в CFT_1 [6] следующим соотношением

$$\lim_{\rho \to \infty} e^{\sum_{i=1}^{\infty} -\rho j_i} V_{j\tilde{j}}(\rho, z) = C_{j\tilde{j}} F_{h\tilde{h}}(z),$$

где $V_{j\tilde{j}}(\rho, z)$ — матричный элемент n-точечной вильсоновской сети, $F_{h\tilde{h}}(z)$ — глобальный конформный блок с весами $h = -j$.

Таким образом, в работе показано, что вычисление матричных элементов n-точечных вильсоновских сетей является одним из способов получения явных выражений для глобальных конформных блоков.

Литература

1. *Witten E.* Quantum field theory and the Jones polynomial // Commun. Math. Phys. 1989. V. 121(3). P. 351–399.
2. *Verlinde H.* Conformal field theory, two-dimensional quantum gravity and quantization of Teichmüller space // Nuclear Phys. B. 1990. V. 337(3). P. 652–680.
3. *Labastida J. M. F., Ramallo A. V.* Chern-Simons theory and conformal blocks // Phys. Lett. B. 1989. V. 228(2). P. 214–222.
4. *Bhatta A., Raman P., Suryanarayana N. V.* Holographic conformal partial waves as gravitational open Wilson networks // J. High Energy Phys. 2016. V. 2016(6). P. 1–36.
5. *Besken M.* [et al.]. Holographic conformal blocks from interacting Wilson lines // J. High Energy Phys. 2016. V. 2016(8). P. 1–35.
6. *Rosenhaus V.* Multipoint conformal blocks in the comb channel // J. High Energy Phys. 2019. V. 2019(2). P. 1–35.

УДК 539.1

Вычисление спиновой асимметрии в процессе рассеяния поляризованных дейтронов на углероде и кислороде

Г. А. Симонян

Новосибирский государственный университет
Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Нарушение пространственной четности является эффектом слабого взаимодействия. Этот феномен привлекает внимание исследователей, особенно в контексте ядерной физики, где проводятся эксперименты по изучению спиновой асимметрии в сечениях рассеяния протонов на протонах и других ядрах. При энергиях до 221 МэВ наблюдается некоторая асимметрия, которая, вероятно, увеличится с повышением энергии, как продемонстрировано экспериментом в лаборатории Argonne, где зафиксирована спиновая асимметрия на уровне более 10–6 в рассеянии протонов на молекулах воды.

Работы [1–3], посвященные вычислению спиновой асимметрии в рассеянии протонов на протонах, ядрах и дейтронах, показали, что предпочтительнее использовать поляризованные дейтроны. Также поляризованные дейтроны проще ускорять, чем поляризованные протоны. С учетом этого, целью текущей работы является вычисление асимметрии в процессе рассеяния дейтронов с высокой энергией около 6 ГэВ на ядрах углерода и кислорода. Для этой цели используется приближение Глаубера, основанное на эйкональном подходе, и теория Ферми для анализа слабого взаимодействия. Полная амплитуда взаимодействия нуклонов в данном приближении может быть представлена в виде:

$$T(q) = T_s(q) + T_w(q) - \frac{i}{2}\int \frac{d^2\mathrm{q}'}{(2\pi)^2} T_s(q')T_w(q-q'), \tag{1}$$

где q — поперечный импульс рассеянного дейтрона, $T_s(q)$ — амплитуда сильного взаимодействия, $T_w(q)$ — амплитуда слабого взаимодействия с учетом радиационных поправок к P-нечетному гамильтониану за счет сильного взаимодействия. Для вычисления амплитуды сильного взаимодействия используется следующая параметризация:

$$T_s(q) = -\sigma_s(i+\varepsilon)e^{-\frac{\beta^2 q^2}{2}}, \tag{2}$$

где параметры определяются через экспериментальные данные. Амплитуда слабого взаимодействия находится через эффективный гамильтониан:

$$H_W^{(0)} = -\frac{G}{\sqrt{2}}[j_\mu^{ch} j_\mu^{ch} + j_\mu^0 j_\mu^0], \tag{3}$$

где G — константа Ферми, j_μ^{ch} и j_μ^0— кварковые заряженный и нейтральный слабые токи. Для протон-протонного рассеяния учитывается обмен ро-мезоном [1]. Была получена формула для вычисления сечения квазиупругого рассеяния дейтронов на ядрах углерода и кислорода.

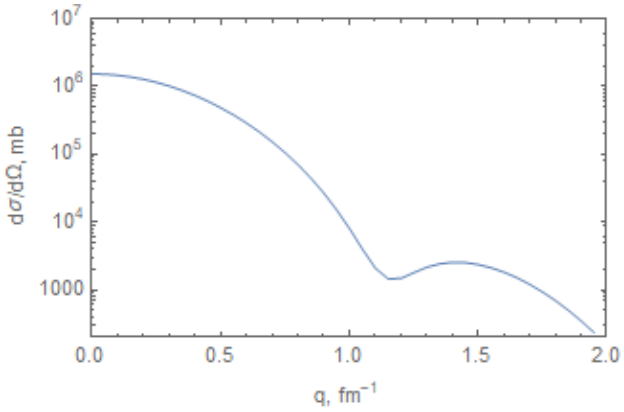


Рис. 1. Зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния дейтронов на ядрах углерода от переданного импульса

В результате были рассчитаны полное, упругое, неупругое и квазиупругое сечения рассеяния, связанные как с сильным, так и со слабым взаимодействиями, а также получено предсказание для спиновой асимметрии. Было получено дифференциальное сечение упругого рассеяния дейтрона на углероде (см. рис. 1).

Предложение о проведении эксперимента по рассеянию поляризованных дейтронов на ядрах на коллайдере NICA в городе Дубна становится важным следующим шагом для проверки этих предсказаний на практике.

Литература

1. *Мильштейн А. И., Николаев Н. Н., Сальников С. Г.* Нарушение четности в протон-протонном рассеянии при высоких энергиях // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111. № 4. С. 215–218.
2. *Мильштейн А. И., Николаев Н. Н., Сальников С. Г.* Несохранение четности в протон-дейтронном рассеянии // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 112. № 6. С. 352–356.
3. *Мильштейн А. И., Николаев Н. Н., Сальников С. Г.* Нарушение четности в рассеянии протона на углероде и кислороде // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114. № 10. С. 631 –634.

УДК 530.145

Эффективная гравитационная масса в пространстве де Ситтера

Д. И. Садеков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

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

С помощью нестационарной диаграммной техники Келдыша–Швингера мы найдем однопетлевое эффективное действие для гравитона на фоне пространства де Ситтера, взаимодействующего со скалярным полем и изучим эффективную массу в тензорном и скалярном секторе мод гравитона, рассматриваемого как малое космологическое возмущение [2]. Поле метрики при этом рассматривается на классическом уровне. Оказывается, что в максимально симметричном состоянии Банча–Дэвиса эффективная масса тензорной моды равна нулю. Однако в скалярном секторе наблюдается ненулевое значение индуцированной массы, как мы явно показываем в простейшем случае двумерного пространства-времени.

Литература

1. *Popov F. K.* Debye mass in de Sitter space // J. High Energ. Phys. 2018. V. 06: 033.
2. *Sadekov D*. Effective graviton mass in de Sitter space // Phys. Rev. D. 2024. V. 109: 085001.

УДК 539.1.01

N=2 суперсимметричные модели высших спинов: проекторы на различные состояния гипермультиплета

***Е. И. Еремеев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова, ОИЯИ

В данной работе будет произведено обобщение алгоритма построения проекторов, приведенных в статье [3], на d=4 N=2 суперпространстве с использованием операторов Казимира для суперспина и суперизоспина, алгоритм получения которых описан в статье [2].

В случае N=1 суперпространства известен вид оператора Казимира (оператора квадрата суперспина в этом случае) через операторы ковариантной производной:

$$\mathbb{C}_2 = \frac{3}{4}\left(-\mathrm{P}^2 + \frac{1}{16}(\mathrm{D}^2\bar{\mathrm{D}}^2 + \bar{\mathrm{D}}^2\mathrm{D}^2)\right).$$

Но более информативным его вид становится после введения проекторов на левокиральное, правокиральное и «линейно-антилинейное» (LAL) пространства:

$$P_+ = \frac{1}{16P^2}\bar{D}^2D^2; P_- = \frac{1}{16P^2}D^2\bar{D}^2; P_{LAL} = -\frac{1}{8P^2}D^\alpha\bar{D}^2D_\alpha; P_+ + P_- + P_{LAL} = 1.$$

Тогда оператор квадрата суперспина будет выглядеть так:

$$\tilde{C_2} = P^4\left(\frac{3}{4}P_{LAL} + 0\cdot P_{+.} + 0\cdot P_-\right),$$

что показывает, что киральные пространства имеют суперспин 0, а LAL пространство — спин 1/2.

На текущий момент получены выражения для операторов суперспина и суперизоспина для N=2 суперпространства:

$$C_2^{N=2} = -\frac{P^2}{32}\left[D^i,\bar{D}_i\right]^2 + \frac{1}{64}\left[D^iP,\bar{D}_i\right]^2; C_2 = \frac{1}{16P^4}\left[D^iP,\bar{D}_J\right]\left[D^jP,\bar{D}_i\right] - \frac{1}{32}\left[D^iP,\bar{D}_i\right]^2.$$

но пока еще не выделены проекторы и не найдены соответствующие пространства. Далее после выделения проекторов нужно обобщить алгоритм, описанный в статье [2], на N=2, и обобщить также на гармоническое суперпространство описанное в [1] и провести аналогии с работой [4].

Литература

1. *Galperin A. S., Ivanov E. A.* [et al.] Harmonic superspace. — Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
2. *Rittenberg V., Sokatchev E.* Decomposition of extended superfields into irreducible represetnations of supersymmetry // Nucl. Phys. B. V. 193. P. 477–501.
3. *Hutchings D., Michael P.* Spin-(s,j) projectors and gauge-invariant spin-s actions in maximally symmetric backgrounds // arXiv preprint. [2024]. arXiv: 2401.04523.
4. *Buchbinder I., Ivanov. E., Zaigraev N.* Unconstrained off-shell superfield formulation of 4D, N=2 supersymmetric higher spins // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2109.07639.

УДК 539.12.01

Новые функции расщепления для неупругого темного тормозного излучения протона

***Е. А. Крюкова*[1,2]**

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В настоящее время одним из наиболее популярных способов описать структуру расширения Стандартной модели (СМ) является т.н. формализм порталов [1]. В нем помимо частиц СМ и пока неизвестных частиц скрытого сектора выделяют гипотетические частицы-медиаторы. В неминимальных моделях медиаторы могут взаимодействовать как с частицами СМ, так и с частицами скрытого сектора. Существуют всего три перенормируемых портала — скалярный, векторный и фермионный. Скалярный портал традиционно реализуется при помощи взаимодействия медиаторов-темных скаляров с бозоном Хиггса. Медиаторы фермионного портала, тяжелые нейтральные лептоны, взаимодействуют с лептонами и бозоном Хиггса. Векторный портал осуществляется гипотетическими массивными векторными бозонами, темными фотонами, которые кинетически смешиваются с фотонами СМ.

В работе рассмотрена минимальная модель векторного портала. Изучается рождение темных фотонов массой 0.4–1.8 ГэВ в протон-протонных столкновениях в процессе неупругого тормозного излучения $pp \to \gamma' X$. При этом в отличие от известных в литературе результатов, учитывается вклад обоих электромагнитных формфакторов протона: как формфактора Дирака F_1, так и формфактора Паули F_2. Основываясь на методе, предложенном в [2] для дираковской части вершины $pp\gamma$, из амплитуды неупругого тормозного излучения был выделен вклад подпроцесса $pp \to X$. Получены аналоги функций расщепления Альтарелли-Паризи для всех квадратичных комбинаций формфакторов Дирака и Паули. Показано, что без учета величины электромагнитных формфакторов вклад слагаемых, связанных с паулиевской частью электромагнитной вершины (т.е. с переворотом спина), действительно подавлен по сравнению с вкладом дираковской части.

Однако для оценки величины полного сечения неупругого тормозного излучения необходимо учесть величину обоих формфакторов. При этом основная трудность заключается в том, что актуальная

для подобных исследований область значений квадрата импульса фотона является нефизической для современных экспериментов по измерению электромагнитных формфакторов в реакциях $e^+e^- \to N\bar{N}$, $e^-N \to e^-N$. Для оценок приходится использовать экспериментальные фиты электрического и магнитного формфакторов, аналитически продолженные в нефизическую область и, как следствие, не вполне точно определенные. В работе полное сечение найдено с помощью двух подобных семейств формфакторов — широко используемого в исследованиях феноменологии темного фотона фита [3] и обновленного фита [4], основанного на более современных экспериментальных результатах. Несмотря на различия в величине сечения, предсказанной для различных способов восстановления формфакторов в нефизической области, в обоих случаях наблюдаются заметные интервалы значений масс темного фотона, в которых ранее неучтенные вклады в полное сечение, пропорциональные квадрату паулиевского формфактора, оказываются определяющими.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» № 21-2-10-37-1.

Литература

1. *Lanfranchi G., Pospelov M., Schuster P.* The Search for Feebly Interacting Particles // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 2021. V. 71. P. 279–313.
2. *Foroughi-Abari S., Ritz A.* Dark sector production via proton bremsstrahlung // Phys. Rev. D 2022. V. 105(9): 095045.
3. *Faessler A., Krivoruchenko M. I., Martemyanov B. V.* Once more on electromagnetic form factors of nucleons in extended vector meson dominance model // Phys. Rev. C 2010. V. 82: 038201.
4. *Lin Y. H., Hammer H. W., Meissner U. G.* New Insights into the Nucleon's Electromagnetic Structure // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 128(5): 052002.

УДК 533.922

Рождение частиц в расширяющихся пространствах

И. А. Белькович

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Физическое явление рождения частиц во внешних полях представляет большой теоретический интерес. В частности, теоретически предсказано рождение частиц в расширяющихся пространствах. Примером такого пространства является пространство Де-Ситтера. Существует два метода вычисления скорости рождения пар частиц. Первый основан на вычислении через коэффициенты преобразования Боголюбова между начальным и конечным вакуумом:

$$V_4\Gamma_1 = \frac{V_3}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \ln|\alpha_p|. \quad (1)$$

Второй метод заключается в вычислении мнимой части эффективного действия через мнимую часть фейнмановского in-out пропагатора в совпадающих точках:

$$V_4\Gamma_2 = -\frac{1}{2} \int d^4x\sqrt{|g|} \int_\infty^{m^2} dm^2 \; Im\, G(x,x). \quad (2)$$

Когда пространство расширяется конечное время, число рожденных частиц также конечно. В этом случае приведенные выше формулы совпадают. Чтобы это увидеть нужно в формуле (2) поменять местами интеграл по координатам и интеграл по импульсам, через последний выражается мнимая часть пропагатора. В случае, когда пространство бесконечно расширяется, число рожденных частиц бесконечно. Если поменять интегралы местами, то интеграл по координатам будет расходиться. В этом случае менять интегралы местами нельзя.

В работе показано, что два вышеупомянутых метода дают разные ответы для скорости рождающихся частиц на примере пространства Де-Ситтера в координатах Пуанкаре и глобальных координатах, а также на примере верхнего квадранта пространства Минковского. А именно, в глобальных координатах скорость рождения частиц большой массы имеет вид:

$$\Gamma_1 \approx \frac{H^4}{8\pi^2}\left(\frac{m}{H}\right)^3 e^{-2\pi\frac{m}{H}}, \qquad \Gamma_2 \approx \frac{2H^4}{\pi^2} e^{-2\pi\frac{m}{H}}, \qquad m \gg H\,.$$

Такая особенность в отличии результатов характерна ситуациям, в которых рождение частиц связано с расширением пространства, т. е. с метрикой. В то же время, для вычисления скорости рождения частиц во внешнем электрическом поле эти два метода будут давать одинаковый ответ, несмотря на бесконечное число рожденных частиц за все время наблюдения.

УДК 530.24

Новый вакуум в голоморфной теории высших спинов в AdS_4

И. С. Фаляхов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Уравнения высших спинов стандартно пишутся в терминах производящих функций:

$$d_x\omega + \omega * \omega = Y(\omega,\omega,C) + Y(\omega,\omega,C,C) + \ldots$$

$$d_x C + \omega * C - C * \pi(\omega) = Y(\omega,C,C) + Y(\omega,C,C,C) + \ldots$$

Поле ω содержит в себе калибровочные поля спина $s \geq 1$, поле C содержит кривизны вместе со скалярным полем. Функции Y в правой части называют вертексами. На линейном уровне по C эта система дает свободные уравнения полей. Соответственно, полная система описывает поля высших спинов со взаимодействиями. Подробности можно посмотреть в обзоре [1]. До недавнего времени явный вид вертексов, удовлетворяющих условию локальности, не был известен. На сегодняшний день имеется производящая система типа уравнений Васильева, из которой вертексы восстанавливаются по порядкам C [2].

Стандартным вакуумом называют

$$\omega = \omega_{AdS}, C = 0.$$

Это случай пустого пространства AdS, то есть пространства с ненулевой космологической постоянной. Ранее считалось, что в вакуумном состоянии C не может быть ненулевым, поскольку это повлекло бы за собой разрушение антидеситтеровского вакуума (так называемый, back-reaction).

В работе показано, что существует точное решение системы с ненулевым C, не разрушающее вакуум ω_{AdS} в размерности 3+1. Найденное решение представляет собой двухпараметрическое семейство

$$W = \omega_{AdS} + \nu_2\, w,$$

$$C = \nu_1 C_1 + \nu_2 C_2,$$

$$C_1 = re^p, C_2 = -r(1+p)e^p, p = y\bar{y}.$$

Первая ветвь явно сохраняет ω_{AdS}, в то время как из второй ветви приходит поправка w. Обе ветви решений описывают скалярное возмущение, причем оно имеет радиальное направление в AdS. Смысл поправки w до конца не ясен, однако есть основания считать ее артефактом неявной Лоренц-ковариантности уравнений. Найденный вакуум нарушает глобальную симметрию высших спинов, обладая остаточной симметрией относительно трехмерной группы Пуанкаре. Соответственно, он является кандидатом на описание спонтанно нарушенной фазы в трех измерениях, в которой должен возникнуть спектр массивных состояний.

Литература

1. *Didenko V. E., Skvortsov E. D.* Elements of Vasiliev theory // arXiv preprint. [2014]. arXiv: 1401.2975v5.
2. *Didenko V. E.* On holomorphic sector of higher-spin theory // J. High Energ. Phys. 2022. V.2022: 191. DOI: 10.1007/JHEP10(2022)191.

УДК 530.145.81, 530.145.84

О моделях открытых квантовых систем с непрерывным спектром в пределе малой плотности

***И. А. Лопатин*[1,2], *А. Н. Печень*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Математический институт им. В. А. Стеклова РАН

Важной задачей в теории открытых квантовых систем является описание мастер-уравнений для редуцированной динамики открытой квантовой системы в различных приближениях на основе ее точной микроскопической динамики при взаимодействии с окружением. Широко известным приближением является предел слабой связи, при котором интенсивность взаимодействия системы с окружением является малой величиной [1], и тесно связанный с ним стохастический предел [2]. Другим известным приближением является предел малой плотности, при котором плотность числа частиц окружения является малой величиной, в то время как взаимодействие между системой и резервуаром не предполагается малым. Такой предел описывает столкновительную декогеренцию [3]. Исследование предела малой плотности в теории открытых квантовых систем восходит к работе [4] и развивалось в ряде последующих работ, например [5, 6] и др. В пределе малой плотности для открытых квантовых систем были выведены квантовое уравнение Ланжевена [7] и квантовое стохастическое дифференциальное уравнение с квантовым процессом Пуассона [8]. Установлена связь этого приближения с моделями столкновительной декогеренции [9]. В настоящей работе рассматривается предел низкой плотности для квантовой системы, взаимодействующей с идеальным Ферми-газом, находящемся в тепловом равновесии при ненулевой температуре. Предел малой плотности задается следующим образом:

$$n_\varepsilon = n_0\varepsilon, t_\varepsilon = t_0\varepsilon^{-1}, \varepsilon \downarrow 0 \tag{1}$$

где t_0, n_0 начальные время и плотность. Пусть H_s — самосопряженный оператор, определенный на всюду плотном подмножестве пространства состояний системы H (в общем случае, бесконечномерного), соответствующий гамильтониану системы. Под $H_\varepsilon = d\Gamma(h_e - \mu_\varepsilon I)$ обозначим вторично квантованный гамильтониан идеального Ферми-газа, действующий в антисимметричном пространстве Фока, где h_e — одночастичный гамильтониан, μ_ε — химический потенциал, определяемый n_ε (1). Общий гамильтониан «система + газ» задается как

$$H_\varepsilon^g = \mathrm{H}_0 + V = H_s \otimes I_r + I_s \otimes H_\varepsilon + V, \tag{2}$$

где V — оператор взаимодействия. Временная эволюция наблюдаемой A, порожденная гамильтонианом (2), есть решение уравнения фон Неймана

$$\frac{dA}{dt} = i\big[H_\varepsilon^g, A\big]. \tag{3}$$

Динамика, порожденная свободным гамильтонианом H_0, является унитарной и раскладывается на тензорное произведение свободной динамики системы T^S и свободной динамики резервуара ${T_\varepsilon}^R$, порожденной H_ε, а динамика с учетом взаимодействия, задаваемая (3), строится с помощью ряда Дайсона в пределе (1). Цель работы — получить редуцированную динамику системы, то есть явное или замкнутое уравнение эволюции системы, не включающее в себя операторы в пространстве резервуара.

Начальное состояние для Ферми-газа определяется как линейный непрерывный положительный функционал на алгебре канонических антикоммутационных соотношений. Для теплового равновесия рассматривается КМШ–состояние (состояние Кубо–Мартина–Швингера), являющееся обобщением распределения Гиббса на случай бесконечномерных квантовых систем [10]. Предел низкой плотности в случае, когда пространство системы H является конечномерным (евклидовым), достаточно подробно исследован [4]. Однако данные результаты не переносятся на случай, когда H бесконечномерное (гильбертово).

В настоящей работе рассматривается взаимодействие типа рассеяния, то есть, когда частицы газа не могут поглощаться системой и их число постоянно. Тогда тензорный множитель оператора V, соотнесенный с резервуаром, есть полином Вика от операторов рождения/уничтожения в пространстве Фока [4, 11]. В работе производится анализ интегралов следующего вида:

$$\int_{\Delta_k(t)} \omega_\varepsilon\big(a_\varepsilon^*(t_1)a_\varepsilon(t_1) \dots a_\varepsilon^*(t_k)a_\varepsilon(t_k)\big)dt_1 \dots dt_k, \tag{4}$$

где $a_\varepsilon{}^*(t)$, $a_\varepsilon(t)$ — свободная эволюция операторов рождения/уничтожения $a^*(f), a(g)$, порожденная динамикой $T_\varepsilon{}^R$, ω_ε — КМШ-состояние, ассоциированное с $T_\varepsilon{}^R$, а область интегрирования есть

$$\Delta_k(t) = \{t_1, \dots, t_k \in [0,t] \wedge t_j < t_{j+1}, j = 1, \dots, k-1\}.$$

Интегралы вида (4) входят в ряд Дайсона, для решения (3) в пределе (1). Интегралы (4) представляют собой сумму слагаемых, каждое из которых может быть ассоциировано со своей диаграммой Фридрихса [12, 13]. Диаграммы Фридрихса представляют собой ориентированный граф с упорядоченными или пронумерованными вершинами, возможно с петлями и кратными ребрами.

В работе доказано, что некоторые слагаемые из (4) стремятся к нулю в пределе (1), выведен критерий в терминах топологии соответствующей диаграммы Фридрихса, когда слагаемое не мало в пределе. А именно доказано, что достаточно рассматривать полиномы Вика только первого порядка, то есть резервуарная часть оператора V имеет вид $a^*(f)\, a(g)$, а слагаемые от полиномов большей степени можно свести к диаграммам, соотносимыми с полиномами первой степени. В таком случае диаграмма Фридрихса распадается на циклы. Доказано, что если диаграмма не является планарной (ребра разных циклов пересекаются), то соответствующее ей слагаемое исчезает в пределе. Сформулировано условие на циклы, необходимое, чтобы диаграмма не была асимптотически малой: каждый цикл может содержать только одно спаривание вида $\omega_\varepsilon\ (a^*(\dots)a(\dots))$. Для всех оставшихся случаев найдены аналитические, замкнутые формулы суммирования, в том числе доказана факторизация по циклам диаграммы. Эти результаты используются в выводе мастер-уравнений для некоторых открытых квантовых систем в пределе низкой плотности.

Литература

1. *Spohn H., Lebowitz J. L.* Irreversible thermodynamics for quantum systems weakly coupled to thermal reservoirs //Adv. Chem. Phys. 2007. V. 38. P. 109–142.
2. *Accardi L., Lu Y. G., Volovich I.* Quantum theory and its stochastic limit. — Heidelberg: Springer, 2013.
3. *Campbell S., Vacchini B*. Collision models in open system dynamics: A versatile tool for deeper insights? // Europhys. Lett. 2021. V. 133(6): 60001.
4. *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. P. 331–359.
5. *Accardi L., Lu Y. G.* The low-density limit of quantum systems // J. Phys. A: Math. Gen. 1991. V. 24(15): 3483.
6. *Rudnicki S., Alicki R., Sadowski S.* The low-density limit in terms of collective squeezed vectors // J. Math. Phys. 1992. V. 33(7). P. 2607–2617.
7. *Accardi L., Pechen A. N., Volovich I. V.* A stochastic golden rule and quantum Langevin equation for the low density limit // Infin. Dimension. Anal. Quantum Probab. Relat. Top. 2003. V. 6(03). P. 431–453.
8. *Pechen A. N.* Quantum stochastic equation for a test particle interacting with a dilute Bose gas // J. Math. Phys. 2004. V. 45(1). P. 400–417.
9. *Filippov S. N., Semin G. N., Pechen A. N.* Quantum master equations for a system interacting with a quantum gas in the low-density limit and for the semiclassical collision model // Physical Review A. 2020. V. 101(1): 012114.
10. *Bratelli O., Robinson D. W.* Operator algebras and quantum statistical mechanics 1. — Heidelberg: Springer, 2012.
11. *Davies E. B.* Markovian master equations // Commun. Math. Phys. 1974. V. 39. P. 91–110.
12. *Xenn K.* Теория перенормировок: пер. с фр. — М.: Наука, 1974.
13. *Фридрихс К.* Возмущение спектра операторов в гильбертовом пространстве: пер. с англ. — М.: Мир, 1969.

УДК 51-73

Представления алгебры Ли группы диффеоморфизмов *d*-мерного пространства

М. И. Гозман

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Согласно общему определению, линейное представление группы диффеоморфизмов — это отображение диффеоморфизмов $x^\mu = F^\mu(x')$ ($\mu = 0,1, \dots, d-1$) на множество линейных операторов $\check{L}_{x=F(x')}$, действующих на некотором комплексном линейном пространстве, которое называется пространством представления. Оператор инфинитезимального диффеоморфизма $x^\mu = x'^\mu + \varepsilon f^\mu(x')$ (ε — малое), действующий на пространстве представления, имеет вид

$$\check{L}_{x=x'+\varepsilon f(x')} = \mathrm{id} - i\varepsilon\, \check{I}_{f(x)} = \mathrm{id} - i\varepsilon \int dx\, f^\mu(x)\, \check{I}_\mu(x)\,, \qquad (1)$$

где id — единичный оператор, $\check{I}_{f(x)}$ и $\check{I}_{\mu}(x)$ — линейные операторы, действующие на пространстве представления (по повторяющимся индексам подразумевается суммирование). Операторы $-i\,\check{I}_{\mu}(x)$ представляют собой генераторы диффеоморфизмов и образуют алгебру Ли этой группы. Для операторов $\check{I}_{f(x)}$, которые выражаются через генераторы, выполняется коммутационное соотношение

$$\left[\,\check{I}_{f(x)}\,,\check{I}_{g(x)}\right] = i\int dx\,\left(f^{\sigma}(x)\,\frac{\partial g^{\mu}}{\partial x^{\sigma}}(x) - g^{\sigma}(x)\,\frac{\partial f^{\mu}}{\partial x^{\sigma}}(x)\right)\check{I}_{\mu}(x)\,. \tag{2}$$

Если $f^{\mu}(x) = \delta^{\mu}_{\tau}$, то операторы $\check{I}_{f(x)}$ отвечают малым трансляциям и обозначаются $\check{I}^{\mathrm{tr}}_{\tau}$. Эти операторы коммутируют между собой, поэтому базис пространства представления можно построить из векторов, собственных для этих операторов. Эти вектора обозначены e_{pn}, где $p = \{p_{\tau}\,, \tau = 0{,}1, \dots, d-1\}$ — набор собственных значений ($\check{I}^{\mathrm{tr}}_{\tau}\,e_{pn} = p_{\tau}\,e_{pn}$), n — индекс, различающий базисные элементы с одинаковыми p. Индекс n принимает M различных значений, и число M называется мультиплетностью представления.

Также вводятся операторы

$$\check{I}_{\mu}(\Delta) = \int dx\,e^{-i\,\Delta\cdot x}\,\check{I}_{\mu}(x)\,, \tag{3}$$

которые, действуя на элементы базиса e_{pn}, меняют их собственные значения p:

$$\check{I}_{\mu}(\Delta)\,e_{pn} = \sum_{m=1}^{M}\left(A_{\mu}\,{}^{p+\Delta}_{p}\right)^{m}_{n}\,e_{p+\Delta,m}. \tag{4}$$

Коэффициенты $\left(A_{\mu}\,{}^{p+\Delta}_{p}\right)^{m}_{n}$ удобно представить в виде матриц размером $M\times M$. Для этих матриц получено уравнение

$$A_{\mu}\,{}^{p+\Delta}_{p}\,A_{\tau}\,{}^{p+\Delta+\Delta'}_{p+\Delta} - A_{\tau}\,{}^{p+\Delta'}_{p}A_{\mu}\,{}^{p+\Delta+\Delta'}_{p+\Delta'} = \Delta_{\tau}\,A_{\mu}\,{}^{p+\Delta+\Delta'}_{p} - \Delta'_{\mu}\,A_{\tau}\,{}^{p+\Delta+\Delta'}_{p}. \tag{5}$$

Доказано, что матрицы $A_{\mu}\,{}^{q}_{p}$ полностью определяют представление алгебры Ли группы диффеоморфизмов.

Матрицы $A_{\mu}\,{}^{q}_{p}$ определены неоднозначно, поскольку базисные вектора e_{pn} можно выбирать поразному. В связи с этим возникает задача отыскания характеристик представления, не зависящих от выбора базиса. При решении этой задачи было показано, что для любого представления существует базис, в котором матрицы $A_{\mu}\,{}^{q}_{p}$ обладают следующим свойством:

$$A_{\mu}\,{}^{p+\Delta}_{p}\big|_{\Delta\to 0} \approx p_{\mu}E + \sum_{\tau}\Delta_{\tau}\,\frac{p_{\mu}}{p_{\tau}}\,J^{\tau}_{\mu}\,, \tag{6}$$

где E — единичная матрица, J^{τ}_{μ} — матрицы, которые не зависят от p, равны нулю при $\mu = \tau$ и удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\left[\,J^{\sigma}_{\mu}\,,J^{\tau}_{\gamma}\,\right] = \delta^{\tau}_{\mu}\left(J^{\sigma}_{\mu} - J^{\sigma}_{\gamma}\right) + \delta^{\sigma}_{\gamma}\left(J^{\tau}_{\mu} - J^{\tau}_{\gamma}\right) - \delta^{\sigma\tau}\left(J^{\sigma}_{\mu} - J^{\tau}_{\gamma}\right). \tag{7}$$

Этот базис был назван J-базисом.

Предложенная схема была использована для исследования представлений алгебры Ли группы диффеоморфизмов в двумерном пространстве. Для частного случая, когда каждая матрица $A_{\mu}\,{}^{q}_{p}$ диагонализируема при $q_{\mu} = p_{\mu}$ (такие представления получили название «примитивных»), было получено общее решение уравнения (5) в J-базисе.

Показано, что простейшие тензорные поля (скалярное поле, ковариантное и контравариантное векторное поле) при диффеоморфизмах преобразуются по «примитивным» представлениям. (Отметим, что тензорные поля второго и более высоких рангов строятся как прямые произведения векторных полей. Это значит, что все представления, описывающие тензорные поля, выводятся из «примитивных» представлений.)

Для двумерного пространства построены некоторые новые представления. Они интересны тем, что вектора, образующие пространства этих представлений, не описываются тензорными полями. Одно из этих новых представлений имеет мультиплетность $M = 2$, а матрицы $A_\mu \, {}^{q}_{p}$ равны

$$A_\mu \, {}^{p+\Delta}_{p} = p_\mu E + \Delta_\mu Q + \Delta_\mu \, (p{:}\,\Delta)\, L\,, \tag{8}$$

$$(p{:}\,\Delta) = p_1\Delta_0 - p_0\Delta_1,\; Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\; L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для этого представления доказано, что оно неприводимо, а также что оно не сводится к представлениям, по которым преобразуются векторные поля в двумерном пространстве.

Литература

1. *Желобенко Д. П.* Компактные группы Ли и их представления. — М.: Наука, 1970.
2. *Mann K.* The structure of homeomorphism and diffeomorphism groups // Notices of the American mathematical society. 2021. V. 68(4). P. 482 — 492.
3. *Goldin G.* Lectures on diffeomorphism groups in quantum physics // Contemporary Problems in Mathematical Physics. 2004. P. 3–93.
4. *Исмагилов Р. С.* Об унитарных представлениях группы диффеоморфизмов пространства R^n, $n \geq 2$ // Матем. сб. 1975. Т. 140. № 1. С. 55–71.
5. *Вершик А. М., Гельфанд И. М., Граев М. И.* Представления группы диффеоморфизмов // УМН. 1975. Т. 30. № 6. С. 3–50.
6. *Шавгулидзе Е. Т.* Квазиинвариантные меры относительно групп диффеоморфизмов на пространствах кривых и поверхностей // Вестник Московского университета. Сер. 1. Матем., мех. 1999. № 6. С. 19–25.
7. *Романов Е. Д.* Квазиинвариантные меры и представления группы диффеоморфизмов: дис. канд. физ.-мат. наук. Москва, 2016.

УДК 539.1.01

Эффект аксионного обмена в энергию литий-подобных ионов

***Р. Р. Абдуллин*[1,2]**

[1]СПбПУ Петра Великого
[2]Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт»

Первоначально аксионы появляются в решении Печчеи–Квинна сильной CP-проблемы [1, 2]. теория Печчеи–Квинна (PQ), в которой дополнительная глобальная симметрия U(1), известная как симметрия PQ, вводится в лагранжиан SM QCD и впоследствии спонтанно нарушается. Нарушение симметрии PQ приводит к появлению псевдоскалярного псевдо-Намбу-Голдстоуна, известного как аксион [3, 4]. Еще одной значимой задачей в современной физике является проблема темной материи, в частности, холодной темной материи. Существование последней широко признано на основе многочисленных астрофизических данных [5-7], однако состав темной материи остается менее определенным. Существует несколько возможных кандидатов на роль холодной темной материи, среди которых выделяются аксионы. Эти два аспекта аксиона — его роль в решении проблемы сильной CP-проблемы и то, что он является отличным кандидатом на роль темной материи, представляют собой важные области исследования в современной физике.

В данном исследовании рассматривается вклад аксионного взаимодействия в энергии переходов литий-подобных ионов. Методы прецизионной атомной спектроскопии оказались исключительно эффективными для проверки Стандартной Модели и выявления отклонений от различных ее модификаций. Аксионный обмен способен вызывать сдвиги уровней энергии в рассматриваемых соединениях. В ходе данного исследования производится измерение этих энергетических сдвигов. Полученные данные позволяют установить ограничения на константу аксионного взаимодействия.

Аксион обычно взаимодействует с нуклонами и лептонами, вызывая между ними спин-зависимую силу. Эта сила ограничена. Гамильтониан псевдоскалярного аксиона, взаимодействующего с электронами, может быть записан в следующем виде:

$$H_{int} = 2\frac{m_e}{f_a} A\bar{\psi} i\gamma_5 \psi. \tag{1}$$

В формуле (1) параметр энергетического масштаба f_a параметризирует силу взаимодействия, m_e — масса электрона, ψ — поле Дирака электрона, A — поле аксиона:

$$A = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3\sqrt{2\omega}}\left(a_k e^{-ikx} + a_k^{\dagger} e^{ikx}\right). \quad (2)$$

Далее считаем энергии соответствующих состояний по следующей формуле [9]:

$$E^{(2)} = -4\pi \langle 1S^2 2S|\mathcal{L}_{int}\mathcal{L}_{int}|1S^2 2S\rangle . \quad (3)$$

Аксионный пропогатор может быть записан в следующем виде:

$$D(\omega, \boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) = \left\langle 0\middle|T\left(A^{\mu}(\boldsymbol{r_1})A^{\nu}(\boldsymbol{r_2})\right)\middle|0\right\rangle = -\frac{1}{4\pi i}\frac{e^{i\beta|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|}}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|}, \quad (4)$$

где $\beta = \sqrt{\omega^2 - m_a^2}$, $m_a -$ масса аксиона.

И получено универсальное выражение для приведенного матричного элемента аксиона:

$$\langle ab|I(\omega)|cd\rangle = \sum_{J\,M} (-1)^{j_a - m_{j_a} + J - M + j_b - m_{j_b}} \begin{pmatrix} j_a & J & j_c \\ -m_{j_a} & M & m_{j_c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_b & J & j_d \\ -m_{j_b} & -M & m_{j_d} \end{pmatrix} \times \langle ab||I(\omega)||cd\rangle_J, \quad (5)$$

$$\langle ab||I(\omega)||cd\rangle_J = \iint dr_1\, dr_2 g_J(\beta, r_1, r_2) \times \left(F_a(r_1)G_c(r_1)C(-\varkappa_a, \varkappa_c) + G_a(r_1)F_c(r_1)C(\varkappa_a, -\varkappa_c)\right) \times \left(F_b(r_2)G_d(r_2)C(-\varkappa_b, \varkappa_d) + G_b(r_2)F_d(r_2)C(\varkappa_b, -\varkappa_d)\right), \quad (6)$$

где $g_J(\beta, r_1, r_2) = i\beta[L]j_J(\beta r_<)h_J^{(1)}(\beta r_>) -$ сферические функции Бесселя и Ханкеля первого рода.

Матричный элемент аксиона аналогичен Брейтовской части матричного элемента фотона, что подталкивает к исследованию систем, где Брейтовский вклад явно выражен. Такие системы обычно включают тяжелые заряженные ионы, а значит в них вероятность обнаружения аксионного вклада высока. План дальнейших исследований включает поиск конкретных систем, в которых Брейтовский вклад хорошо выражен. Мы рассматриваем влияние одноаксионного обмена на энергию переходов литий-подобных ионов и стремимся выявить системы, в которых этот вклад максимален.

Литература

1. *Peccei R. D., Quinn H. R*. Constraints imposed by CP conservation in the presence of pseudoparticles // Phys. Rev. D. 1977. V. 16(6). P. 1791–1797.
2. *Peccei R. D., Quinn H. R.* CP conservation in the presence of pseudoparticles // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 38(25). P. 1440–1443.
3. *Weinberg S.* A new light boson // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40(4). P. 223–226.
4. *Wilczek F.* Problem of strong P and T invariance in the presence of instantons // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40(5). P. 279–282.
5. *Bertone G., Hooper D., Silk J*. Particle dark matter: Evidence, candidates and constraints // Phys. Rep. 2005. V. 405. P. 279–390.
6. *Steffen F. D.* Dark-matter candidates: Axions, neutralinos, gravitinos, and axinos // Eur. Phys. J. C. 2005. V.59. P. 557–588.
7. *Komatsu E.* [et al.]. Five-year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe observations: Cosmological interpretation // ApJS. 2009. V. 180(2). P. 330–376.
8. *Mohr P. J.* Quantum electrodynamics of high-Z few-electron atoms // Phys. Rev. A. 1985. V. 32(4). P. 1949–1957.

УДК 53.01

Модель инфляции без начальной сингулярности

Р. Р. Кагиров[1,2]

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

На сегодняшний день в гравитации и в Общей теории относительности, в частности, до сих пор существует множество нерешенных проблем связанных, например, с космологией. Решением этих и

других проблем занимаются ученые по всему миру практически со времен создания ОТО. Сильными мотивами к разработке основного количества новейших альтернатив ОТО служат астрономические наблюдения последних лет, которые привели к необходимости введения в астрофизику и космологию, построенную на общей теории относительности, таких понятий, как «инфляция», «темная материя» и «темная энергия».

Наиболее общей скалярно-тензорной теорией гравитации, включающей в себя как ОТО, так и многие другие модификации, является расширенная теория Хорндески [1], в которой предлагаются замечательные точки зрения для решения различных космологических проблем, такие как эволюция с отскоком или генезисом. Была показана в работах [2, 3] возможность существования целого класса различных космологических сценариев без начальной сингулярности.

Сегодня Инфляционная модель вселенной позволяет решить многие проблемы, возникающие в модели Горячей Вселенной, в частности, благодаря крайне высоким темпам расширения на инфляционной стадии разрешается проблема крупномасштабной однородности и изотропности вселенной, однако в Инфляционной модели присутствует начальная сингулярность, от которой мы избавляемся в нашей работе.

Таким образом, исследуется возможность построения космологических моделей инфляционного типа без сингулярности в прошлом. Основное внимание уделено модели замкнутой Вселенной, которая в асимптотическом прошлом имеет постоянный радиус, а в будущем происходит инфляция и выход на Вселенную, доминированную безмассовым скалярным полем («kination»). Для построения такой модели был выбран масштабный фактор и следующего вида. Здесь размеры Вселенной измеряются в единицах начального радиуса $a_0 \gg L_{Pl}$:

$$a = \frac{e^t + 1}{1 + e^{t-1}} + (1 + t^2)^{\frac{1}{6}} \frac{1}{1 + e^{1-t}}.$$

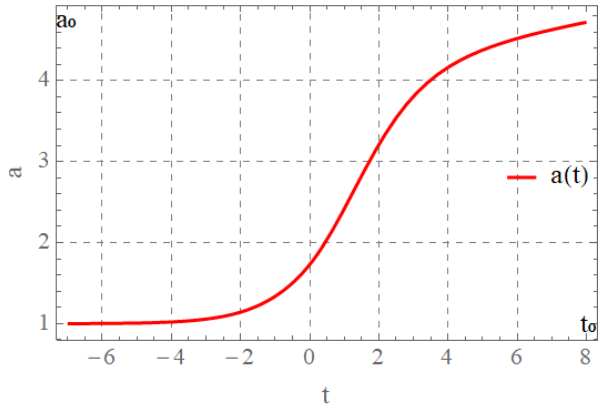


Рис. 1. График зависимости масштабного фактора от времени

Такая эволюция является аналогом модели Генезиса с выходом на инфляцию, но в замкнутой Вселенной. Основной особенностью рассмотренной модели является отсутствие нарушения изотропного условия энергодоминантности (NEC), что позволяет использовать простейший квадратичный подкласс теории Хорндески, то есть фактически скалярное поле с необычным кинетическим членом и общую теорию относительности. Для проверки NEC был вычислен тензор Эйнштейна и проверено следующее неравенство:

$$G_{\mu\nu} n^\mu n^\nu > 0,$$

где n^μ — светоподобный вектор.

Далее, используя уравнения движения, по выбранному масштабному фактору был реконструирован Лагранжиан теории. Основываясь на методе, использованном в работах [2,3], удалось убедиться в отсутствии духов и тахионов в теории. В качестве анзаца для теории рассматривалось действие следующего вида:

$$S = \int d^4x \sqrt{-g}(F(\pi, X) + R),$$

где $X = \frac{1}{2} \partial_\mu \pi \, \partial^\mu \pi$ — стандартный кинетический член.

Используя аппарат теории Хорндески для замкнутой Вселенной, было показано, что модель устойчива на всех временах, то есть в ней не возникает духов и градиентных неустойчивостей, а также численно найден спектр скалярных возмущений, оказавшийся плоским, что соответствует наблюдательным данным.

Для нахождения спектра скалярных возмущений производилось численное решение уравнений движения для возмущений следующего вида для различных значений импульса k:

$$\delta\ddot{\phi}_k + 3\frac{\dot{a}}{a}\delta\dot{\phi}_k + \frac{k^2}{a^2}\delta\phi_k = 0.$$

Здесь точки означают производные по космическому времени t. Если считать, что в далеком прошлом начальные условия для возмущений представляли из себя плоскую волну, то можно с очень хорошей точностью получить плоский спектр скалярных возмущений.

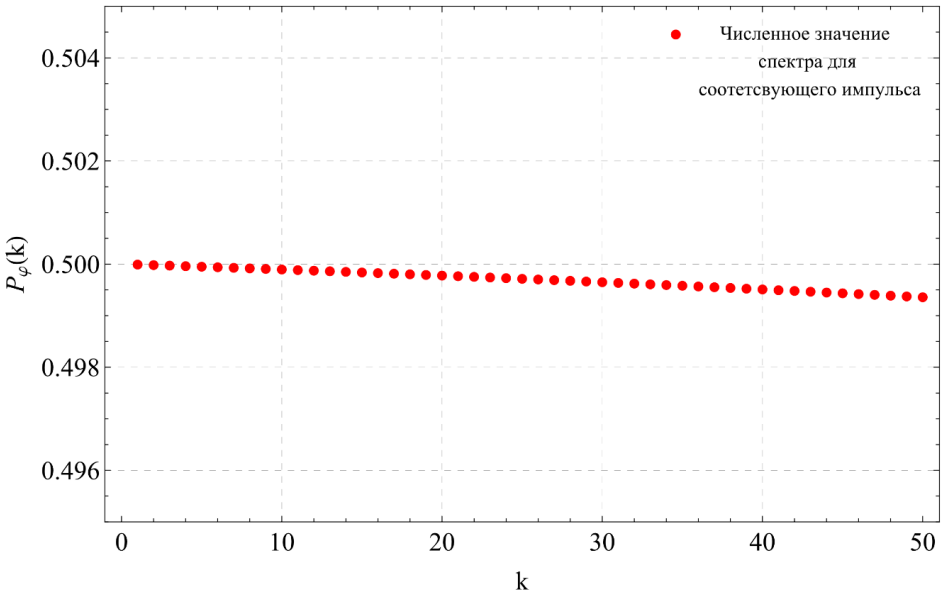


Рис. 2. Численное нахождение спектра скалярных возмущений

Впоследствии планируется улучшить процедуру нахождения спектра, чтобы иметь возможность точно найти его параметры, такие как наклон и амплитуда, а также найти спектр тензорных возмущений. В итоге это позволит поставить ограничения на параметры исследуемой модели.

Литература

1. *Horndeski G. W.* Second-order scalar-tensor field equations in a four-dimensional space // Int. J. Theor. Phys. 1974. V. 10. P. 363–384.
2. *Mironov S., Rubakov V., Volkova V.* Bounce beyond Horndeski with GR asymptotics and γ-crossing // J. Cosmol. Astropart. Phys. 2018. V. 2018(10): 050.
3. *Mironov S., Rubakov V., Volkova V.* Genesis with general relativity asymptotics in beyond Horndeski theory // Phys. Rev. D: Part. Fields. 2019. V. 100(8): 083521.

УДК 51-71

Деформация поливекторами решений IIB супергравитации

***Т. А. Петров*[1], *Э. Т. Мусаев*[1,2]**

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

Исследование теорий, имеющих тесную связь с экспериментальной физикой, таких как суперсимметричные калибровочные теории (SUSY QFT), представляет большой интерес для науки. Современная теоретическая физика обладает множеством инструментов для их исследования, однако среди них, благодарю широкому потенциалу реализуемых на ее основе возможностей, особое место занимает теория струн. На основе ее формализма возможна реализация так называемого AdS/CFT соответствия (голографический принцип), позволяющего связывать результаты, получаемые в гравитационной теории, с результатами на стороне калибровочных теорий. Оно открывает путь к созданию множества методов

изучения калибровочных теорий поля, к примеру к методам генерации решений, позволяющих исследовать свойства семейств калибровочных теорий поля и генерировать новые калибровочные теории поля за счет использования геометрических свойств пространства решений уравнений супергравитации, которая, как известно, является низкоэнергетическим пределом теории струн.

В их число входит и так называемый метод янг-бакстеровой деформации. Он заключается в голографическом отображении специального нелинейного преобразования, задающего семейство решений уравнений супергравитации, в пространство калибровочных теорий поля [2]. Таким образом, получается новое семейство конформных теорий поля. Используемое для этого преобразование называется деформацией Янга-Бакстера и возникает из-за скрытых симметрий пространства решений уравнений супергравитации, наследуемых ей из теории струн, по отношению к которой она является низкоэнергетическим пределом. Оно параметризованно неким известным (начальным) решением уравнений супергравитации и поливектором, построенным из векторов Киллинга начального решения. Наиболее изученный пример представления этой симметрии описывается формулой:

$$(\boldsymbol{G}+\boldsymbol{B})^{-1}=(\boldsymbol{g}+\boldsymbol{b})^{-1}+\boldsymbol{\beta}\,, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{g}$ и $\boldsymbol{b}$ — поля некоторого известного решения уравнений 10D супергравитации, $\boldsymbol{\beta}$ — бивекторный параметр, построенный в базисе векторов Киллинга начального решения.

Изначально формализм, позволяющий строить такое преобразование, был сконструирован для 10-мерной супергравитации с использованием бивектора, построенного на векторах Киллинга. Его координаты в базисе векторов Киллинга удовлетворяли широко известному классическому уравнению Янга-Бакстера [1, 7]:

$$\boldsymbol{\delta}^{i_1 i_3 i_5}_{i'_1 i'_3 i'_5}\boldsymbol{\rho}^{i'_1 i_2}\boldsymbol{\rho}^{i'_3 i_4}\boldsymbol{f}^{i'_5}_{i_2 i_4}=\boldsymbol{0}\,, \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\rho}^{i_1 i_2}$ — координаты бивектора в базисе векторов Киллинга, $\boldsymbol{f}^{i_5}_{i_2 i_4}$ - структурные константы алгебры Ли, которую параметризуют вектора Киллинга начального решения. Это уравнение имеет нетривиальные решения только при таких структурных константах, которые отвечают абелевым изометриям начального решения [5]. Данная проблема существенно ограничивала применимость метода янг-бакстеровой деформации, запрещая широкий класс различных деформаций, а значит и ограничивая его возможности в исследовании пространства конформных теорий поля.

Однако впоследствии был разработано обобщение данного формализма для 11 мерной супергравитации с использованием более широкого класса скрытых симметрии начального решения (наследуемого ей из М-теории), параметризованной в данной реализации тривектором, построенным на векторах Киллинга, отвечающих произвольному компактному многообразию (т.е. включающего неабелевы изометрии)[3,4]. Авторами данной работы было показано, что в его рамках возможно построение деформаций вдоль неабелевых компактных изометрий [6]. Однако реализация голографической дуальности в 11-мерной супергравитации сложна как вычислительно, так и концептуально, не располагая к наглядности и простоте анализа получаемых результатов.

Тем не менее успех обобщения формализма деформаций в 11-мерной супергравитации и наличие у IIB супергравитации, подобно 11 мерной, расширенной скрытой симметрией пространства решений, а также значительно более исследованная и простая реализация голографической дуальности в случае IIB супергравитации по сравнению с реализаций 11-мерном случае, стали мотивацией построения аналогичного обобщения формализма в случае IIB супергравитации. Авторам данной работы удалось достигнуть в этом успеха, реализовав данную скрытую симметрию в пространстве решений IIB супергравитации с 4-векторным параметром, построенном на векторах Киллинга компактного многообразия с неабелевыми изометриями. Было найдено условие на допустимые четырехвекторные параметры, представляющего собой обобщение уравнения Янга–Бакстера:

$$\boldsymbol{\delta}^{\mathbf{a_1 a_2 a_5 a_6 a_7}}_{\mathbf{a'_1 a'_2 a'_5 a'_6 a'_7}}(\boldsymbol{\rho}^{\mathbf{a_1 'a_2 'a_3 a_4}}\boldsymbol{\rho}^{\mathbf{a_5 'a_6 'a_7 'a_8}}\mathbf{f}^{\mathbf{a_9}}_{\mathbf{a_3 a_8}}-\mathbf{3}\boldsymbol{\rho}^{\mathbf{a_1 'a_2 'a_3 a_4}}\boldsymbol{\rho}^{\mathbf{a_5 'a_6 'a_9 a_8}}\mathbf{f}^{\mathbf{a_7 '}}_{\mathbf{a_3 a_8}})=\boldsymbol{0}. \tag{2}$$

Также, с использованием AdS/CFT соответствия, удалось продемонстрировать существование нового, не суперсимметричного конформного многообразия вокруг N=4 SYM.

Литература

1. *Belavin A. A., Drinfeld V. G.* Solutions of the classical Yang–Baxter equation for simple Lie algebras // Funct. Anal. Appl. 1982. V. 16(3). P. 159–180.

2. *Ashmore A.* [et al.]. Exactly marginal deformations and their supergravity duals // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 128(19): 191601.
3. *Malek E., Sakatani Y., Thompson D. C.* E6(6) exceptional Drinfel'd algebras//JHEP. 2021. V. 2021(1): 020.
4. *Bakhmatov I.* [et al.]. Generalizing eleven-dimensional supergravity // Phys. Rev. D. 2022. V. 105(8): L081904.
5. *Bakhmatov I., Gubarev K., Musaev E. T.* Non-abelian tri-vector deformations in d = 11 supergravity //JHEP. 2020. V. 2020(05): 113.
6. *Pop I., Stolin A.* Rational solutions of CYBE for simple compact real Lie algebras//J. Geom. Phys. 2007. V. 57(5). P. 1379–1390.
7. *Musaev E. T., Petrov T.,* Tri-vector deformations on compact isometries // Eur. Phys. J. C 2023. V. 83(5): 399.
8. *Bakhmatov I., Musaev E. T.* Classical Yang-Baxter equation from β-supergravity // JHEP. 2019. V. 2019(01): 140.

УДК 530.145

Применение точно решаемых уравнений Шредингера для получения аналитических потенциалов с эффектами туннелирования

***Н. М. Колганов*[1,2], *Ф. М. Хасанов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

При изучении амплитуды туннелирования, например в двуямном потенциале, возникает понятие флуктуационного оператора, который определяет квадратичное действие. На фоне топологического инстантона, т.е. инстантона с бесконечным периодом, он имеет вид оператора Пешль–Теллера $K = -\partial_\tau^2 + +m^2 - l(l+1)sech^2\tau$, для которого при целых значениях параметров l, m точно известен спектр, собственные функции, а также функция Грина. Некоторым выделенным значениям параметров также соответствуют потенциалы синус-Гордона, кубический, и перевернутый двуямный. Решая обратную задачу, а именно, зная параметры оператора Пешль–Теллера восстановить потенциал, флуктуационный оператор которого равен исходному, мы получили, что для параметров, для которых выполняется неравенство $l - m > 1$ восстановленные потенциалы неаналитичны. Однако рассматривая потенциал как комплексную функцию на некоторой Римановой поверхности мы показали, что на ней он аналитичен и привели несколько примеров [1].

Идея восстановления потенциалов основана на том, что производная инстантонного решения по модулярному параметру, обычно имеющему смысл положения инстантона, является нулевой модой флуктуационного оператора $\dot{x_c}(\tau) = \eta_0(\tau)$. Таким образом, интегрируя известную нулевую моду флуктуационного оператора, мы получаем явное выражение для инстантонного решения $x_c(\tau) = \int^\tau d\tau' \, \eta_0(\tau')$. Инстантонное решение зависит от времени, поэтому подставляя его в закон сохранения энергии для нулевой энергии мы получим выражение для потенциала $V(x_c(\tau)) = \frac{1}{2}\,(\eta_0(\tau))^2$. Не всегда можно обратить инстантонное решение, однако мы всегда можем построить потенциал параметрически

$$(x, V(x)) = (\int^\tau d\tau' \, \eta_0(\tau'), \frac{1}{2}\,(\eta_0(\tau))^2).$$

Несмотря на интересные свойства неалитических потенциалов, полученных нами ранее, мы пытались найти точно решаемые Шредингеровские операторы, которые дают аналитические восстановленные потенциалы. Мы добились этой цели применяя метод восстановления к так называемым Натанзоновским операторам [2], о которых можно думать как о самых общих Шредингеровских операторах, чьи решения выражаются в терминах гипергеометрических функций. Для этих операторов мы получили общий вид восстановленного потенциала в параметрической форме, а затем сосредоточились на их подклассе называемым «форм-инвариантные» (shape-invariant) операторы (особенно на операторах Маннинга-Розена, гиперболическом Пешль–Теллере и Скарфе). Зафиксировав их параметры, требуя аналитичность восстановленных потенциалов мы нашли несколько бесконечных семейств гладких потенциалов. Некоторые из полученных потенциалов обобщают уже известные потенциалы с туннелированием описанные выше, однако некоторые из них имеют совершенно другую форму, например, для Маннинга–Розена получаются трехямные и несимметричные двуямные потенциалы, а для Скарфа получаются потенциалы с квазипериодическими свойствами.

Дальнейшей задачей является квантования полученных потенциалов, а также обобщение метода восстановления на случай бóльших степеней свободы.

Литература

1. *Kolganov N., Hasanov F*. Unperturbation theory: reconstructing Lagrangians from instanton fluctuations // arXiv preprint. [2024]. arXiv: 2402.07165.
2. *Natanzon G. A*. General properties of potentials for which the Schrodinger equation can be solved by means of hypergeometric functions // Theor. Math. Phys. 1979. V. 38. P. 146–153.

УДК 517.958

Нелинейные уравнения в теории открытых квантовых систем на основе проекционных операторов

***Х. Ш. Меретуков*[1], *А. Е. Теретенков*[2]**

[1]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[2]Математический институт им. В. А. Стеклова РАН

Физика открытых квантовых систем занимается исследованием систем, которые могут обмениваться энергией и веществом со своим окружением. Такие системы распространены в большом спектре областей, также почти все реальные системы являются открытыми. Поэтому исследование таких систем является актуальной задачей и данная отрасль активно развивается в последнее время. Основной идей является то, что система и ее окружение вместе образуют одну закрытую систему, которая эволюционирует в соответствии с обычными законами квантовой механики. Однако, при таком подходе мы получаем информацию не только о системе, но и об окружении. Для того, чтобы выделить из этой информации интересующую нас, надо выделить подсистему.

Для выделения подсистемы в данной работе используется подход проекционных операторов. В частности, используется проекционный метод Накажимы-Цванцига, который позволяет получать уравнения, не зависимые от вида проектора, а значит от того, как выделяется подсистема. Конкретно в данной работе используется проектор Кавасаки-Гантона [1-3]. При таком проекторе мы выбираем набор параметров P_i, которые описывают матрицу плотности, которой мы аппроксимируем реальную. Такая матрица плотности максимизирует выбранный вид энтропии, в данном случае максимизируется энтропия Гиббса. Однако, нами был предложен обобщение проектора Кавасаки-Гантона, позволяющее рассматривать произвольные анзацы, параметризованные некоторыми наблюдаемыми, называемыми релевантными [4]

$$P_{KG}\rho = \frac{1}{Z}e^{-\sum P_i F_i}.$$

В данной работе мы исследуем две системы. Первая — двухуровневая система, приведенная в контакт с тепловым резервуаром. Динамика такой системы описывается следующим уравнением Горини–Косаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) [5].

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i\Omega}{2}[\sigma_+ + \sigma_-, \rho(t)] + \gamma_0(N+1)\left(\sigma_-\rho(t)\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho(t)\}\right) + \gamma_0 N\left(\sigma_+\rho(t)\sigma_- - \frac{1}{2}\{\sigma_-\sigma_+, \rho(t)\}\right).$$

В качестве релевантных наблюдаемых берутся матрицы Паули $\{\sigma_1, \sigma_3\}$. Полученное уравнение для средних решается в пределе Боголюбова–ван Хова [6].

Вторая система — модель для затухающего осциллятора (модель Керра с диссипацией)

$$H = -\Delta a^+ a + \frac{\chi}{2}a^+ a^+ aa - iF(a - a^+),$$

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho] + \frac{\gamma}{2}\left(a\rho a^+ - \frac{1}{2}\{a^+ a, \rho\}\right).$$

В данном случае мы используем гауссовский анзатц для матрицы плотности. При таком выборе мы можем свести средние операторов рождения и уничтожения больше 2-го порядка через произведение моментов 1-го и 2-го порядка. Данный подход позволяет рассматривать не только те случаи, когда в нулевом порядке динамика описывается гауссовским каналом, но и рассматривать негауссовские каналы в реальных физических системах как на нелинейные, но гауссовские каналы. Данная особенность особенно полезна, для квантовой теории информации, так известно множество свойств именно гауссовских каналов [7].

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС», грант № 23-2-1-34-1.

Литература

1. *Зубарев Д. Н., Морозов В. Г., Репке Г.* Статистическая механика неравновесных процессов. — М.: Физматлит, 2002.
2. *Semin V., Petruccione F.* Projection Operators in the Theory of Open Quantum Systems // Proceedings of SAIP. 2015. P. 539–544.
3. *Semin V., Petruccione F.* Dynamical and thermodynamical approaches to open quantum systems // Scientific reports (Nature). 2020. V. 10:2607. DOI: 10.1038/s41598-020-59241-7.
4. *Meretukov K. Sh., Teretenkov A. E.* On time-dependent projectors and on generalization of thermodynamical approach to open quantum systems // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2307.00607.
5. *Бройер Х. П., Петруччионе Ф.* Теория открытых систем. — М. Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2010.
6. *Teretenkov A. E.* Non-perturbative effects in corrections to quantum master equations arising in Bogolubov–van Hove limit // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2021. V. 54(26): 265302. DOI: 10.1088/1751-8121/ac0201.
7. *Холево А. С.* Квантовые системы, каналы, информация. — М.: МЦНМО, 2010.

УДК 530.24, 530.13

Билинейные токи в теории высших спинов на AdS_4

***Ю. А. Татаренко*[1,2]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нелинейная теория высших спинов на фоне пространства AdS_4 была сформулирована в виде системы уравнений Васильева [1]. Известно, что на свободном уровне эта система воспроизводит уравнения Фронсдала и Фанга-Фронсдала на AdS_4, но дальнейший пертурбативный анализ уравнений высших спинов достаточно сложен: так, существует целый ряд статей, посвященных изучению калибровочно инвариантных поправок второго порядка, в частности проблеме локальности этих поправок (см., например, [2, 3]). Калибровочно неинвариантные поправки второго порядка в значительно меньшей степени представлены в литературе, так как благодаря свойствам алгебры высших спинов [4, 5] они не играют принципиальной роли при анализе локальности.

В работе рассматриваются как калибровочно инвариантные, так и калибровочно неинвариантные поправки второго порядка. Показано, что они порождают нетривиальные токи в правой части уравнений Фронсдала:

$$(\nabla^2 + \cdots)\phi = g_1 J_{min}^{even} + g_2 J_{max}^{even} + g_3 J_{max}^{odd}\,.$$

Здесь индексы $even$ и odd определяют P-четность тока, а индексы min и max — число производных в токе: у J_{min} оно ограниченно сверху значением $s_1 + s_2 + s_3 - 2\min\{s_1, s_2, s_3\}$, а у J_{max} — значением $s_1 + s_2 + s_3$, где s_1, s_2, s_3 — спины полей, образующих кубическую вершину, которой соответствуют данные токи. Константы связи перед этими токами выражены в терминах комплексной константы $\eta = |\eta| e^{i\vartheta}$, входящей в исходную систему: $g_1 = |\eta|^2, g_2 = |\eta|^2 \cos 2\vartheta\,, g_3 = |\eta|^2 \sin 2\vartheta$. Впервые в литературе было установлено соответствие между билинейными токами в теории Васильева и кубическими вершинами, найденными Мецаевым в калибровке светового конуса [6].

Также, в работе приводятся явные выражения для билинейных токов высших спинов в терминах производных полей Фронсдала (схематично: $J = \sum_{n,m} a_{n,m} (\nabla_1)^n (\nabla_2)^m \phi_1 \phi_2$). Для их получения необходимо осуществить переход от развернутого формализма [7], который используется в нелинейной теории высших спинов, к стандартному. Эта процедура требует фиксации калибровки на свободном уровне, поэтому в ходе работы было найдено обобщение поперечно-бесследовой калибровки на случай развернутых систем.

Таким образом, работа представляет подробный взгляд на билинейные токи высших спинов (в частности, на калибровочно неинвариантные токи), а также позволяет соотнести результаты различных подходов к изучению взаимодействующей теории высших спинов.

Литература

1. *Vasiliev M. A.* More on equations of motion for interacting massless fields of all spins in (3+1)-dimensions // Phys. Lett. B. 1992. V. 285. P. 225–234.
2. *Didenko V. E.* [et al.]. Homotopy Properties and Lower-Order Vertices in Higher-Spin Equations // J. Phys. A. 2018. V. 51: 465202.
3. *Misuna N.* On current contribution to Fronsdal equations // Phys. Lett. B. 2018. V. 778. P. 71–78.
4. *Vasiliev M. A.* Higher spin gauge theories: Star-product and AdS space // arXiv preprint. [1999]. arXiv: hep-th/9910096.
5. *Didenko V. E, Skvortsov E. D.* Elements of Vasiliev theory // arXiv preprint. [2014]. arXiv: 1401.2975.
6. *Metsaev R. R.* Light-cone gauge interaction vertices for massless fields in AdS(4) // Nucl. Phys. B. 2018. V. 936. P. 320–351.
7. *Vasiliev M. A.* Consistent Equations for Interacting Massless Fields of All Spins in the First Order in Curvatures // Annals Phys. 1989. V. 190. P. 59–106.

Секция биофизики

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

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

Секретарь: С. О. Мишина

Дата: 03.04.2024 Время: 12:20

УДК 579.222

Исследование воздействия L-метионин-гамма-лиазы на quorum sensing системы бактерий рода *Vibrio*

А. А. Ясковец, В. О. Матвеева, Н. А. Бондарев, С. В. Баженов, Д. Ф. Багаева, И. В. Манухов

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Некоторые виды бактерий обладают механизмом регуляции Quorum Sensing (QS) - способностью изменять экспрессию определенных генов в ответ на изменение плотности популяции. Такие бактерии производят сигнальные молекулы, называемые аутоиндукторами (АИ), появление которых приводит к координации экспрессии генов у всех организмов в колонии. Данный механизм контролирует различные процессы, такие как вирулентность, подвижность, выделение специфических веществ, биолюминесценцию и некоторые другие [1].

В зависимости от типа АИ выделяют несколько типов QS-систем, при этом один вид бактерий может использовать сразу несколько типов QS-систем для внутри- и межвидовой коммуникации [2]. В частности, бактерии рода *Vibrio*, принадлежащие к кладе *Vibrio harveyi*, как правило используют AI-2, CAI-1 и AHL (4-гидрокси-бутаноил-гомосерина лактон), в биосинтезе каждого из которых участвует в качестве предшественника S-аденозилметионин [3, 4]. При этом при срабатывании QS-системы может наблюдаться увеличение концентрации метионина в бактериальных клетках. Ранее было высказано предложение, что недостаток метионина должен приводить к ингибированию QS-систем бактерий [5].

В данной работе показано, что в найденных в Аральском море штаммах *Vibrio albensis* RK2 и *Vibrio vulnificus* RK27 биолюминесценция регулируется по QS-механизму. Влияние концентрации метионина на работу QS систем этих штаммов исследовано с помощью фермента L-метионин-гамма-лиазы (МГЛ), разлагающего метионин в реакции γ-элиминирования. Проверялась зависимость люминесценции суспензии бактериальных клеток в питательной среде от плотности популяции. Показано, что добавление МГЛ в диапазоне 0,15 МЕ/мл — 1,5 МЕ/мл в культивационную среду ускоряет ответ QS системы для RK27, и при этом замедляет ответ у RK2. Отметим при этом, что добавление метионина в диапазоне концентраций 0,4 мМ — 13 мМ ускоряет срабатывание QS и увеличивает интенсивность люминесценции как для V. *vulnificus* RK27, так и для V. *albensis* RK2.

Нарушение в работе чувства кворума может быть использовано в качестве альтернативного средства антибактериальной терапии.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 22-74-10047.

Литература

1. *Whiteley M., Diggle S. P., Greenberg E. P.* Progress in and promise of bacterial quorum sensing research // Nature. 2017. V. 551(7680). P. 313–320.
2. *Federle M. J., Bassler B. L.* Interspecies communication in bacteria // J. Clin. Invest. 2003. V. 112(9). P. 1291–1299.
3. *Miller M. B.* [et al.]. Parallel Quorum Sensing Systems Converge to Regulate Virulence in Vibrio cholerae // Cell. 2002. V. 110(3). P. 303–314.
4. *Wei Y.* [et al.]. Mechanism of Vibrio cholerae Autoinducer-1 Biosynthesis // ACS Chem. Biol. 2011. V. 6(4). P. 356–365.
5. *Bin P.* [et al.]. Perspective: Methionine Restriction–Induced Longevity—A Possible Role for Inhibiting the Synthesis of Bacterial Quorum Sensing Molecules // Advances in Nutrition. 2020. V. 11(4). P. 773–783.

УДК 577.322

Метод выбора одиночных мутаций с помощью ProteinMPNN и LigandMPNN

А. Д. Бугрова, И. Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

ProteinMPNN — алгоритм дизайна белковых последовательностей на основании структуры остова белка. Он предсказывает последовательности белков, которые часто успешно экспрессируются, сворачиваются в требуемую структуру и выполняют свою функцию. ProteinMPNN показал значительные успехи в инженерии белков, не содержащих небелковые кофакторы [1]. Недавно на основе архитектуры ProteinMPNN был разработан алгоритм LigandMPNN, учитывающий атомный контекст помимо белкового остова. LigandMPNN показал успехи в инженерии белков, связывающих малые молекулы, нуклеиновые кислоты и ионы [2].

В этой работе нами был апробирован метод предсказания одиночных мутаций в белках с помощью ProteinMPNN и LigandMPNN. На практике, внесение одиночных мутаций обычно более предпочтительно и предсказуемо, чем полное изменение последовательности белка. В качестве модельных белков были использованы LOV-домен, фотодекарбоксилаза жирных кислот и родопсины. Для них с помощью ProteinMPNN и LigandMPNN были сгенерированы предсказания аминокислот для каждой отдельной позиции, дальше на основе этих предсказаний были разработаны методы сравнения и отбора потенциально стабилизирующих одиночных мутаций. Получившийся метод может стать полезным инструментом для белковой инженерии.

Литература

1. *Dauparas J.* [et al.] Robust deep learning–based protein sequence design using ProteinMPNN // Science. 2022. V. 378(6615). P. 49-56.
2. *Dauparas J.* [et al.] Atomic context-conditioned protein sequence design using LigandMPNN // bioRxiv preprint. [2023]. bioRxiv: 2023.12.22.573103.

УДК 577.112, 152.3

The study of amyloid beta peptide precursor intramolecular interactions for the development of methods for the treatment of neurodegenerative diseases

T. A. Btaih*, *I. S. Okhrimenko*, *Y. A. Zagryadskaya*, *D. S. Kaplun

Moscow Institute of Physics and Technology

Alzheimer’s disease is the most well-known and widespread type of neurodegenerative disease in the world. It represents about 60–70% of dementia cases in the world. [1] The exact molecular mechanisms of the Alzheimer's disease remain unclear at this moment. Genetic evidence strongly supports the amyloidogenic hypothesis which is based on that toxic amyloid-β peptide (Aβ) oligomers play a crucial role in AD pathogenesis. Aβ is a naturally occurring peptide produced by cleavage of the transmembrane precursor protein (APP) in a proteolytic process resulting from β- and γ-secretase activity [2]. Any defect in the Aβ generation and/or imbalance between Aβ production and its clearance will cause an accumulation of amyloids consist of Aβ in the form of protofibrils and plaques at the points of contact of neurons eventually leading to neuronal death, and small aggregates formed by Aβ was shown to produce toxic effects on the neurons and glial cells [1]. Since all the AD treatments that’s available now are just palliative, huge efforts are expended for the research to find a therapeutic method or therapeutic drugs for this severe disease. The D-enantiomeric peptides which eliminate concentration of toxic small Aβ aggregates were recently developed, and one of these compounds has successfully passed phase II of clinical trials. However, the details of molecular mechanisms of action of these D-peptides are not studied yet. Recent studies proved that the D3 peptide interacts with APP protein in the juxta membrane domain preventing the conversion of Aβ into its β-conformation and inhibits the formation of toxic oligomers [3]. Hence, further study of drugs of this class and molecular mechanisms of their action can help to improve a curative effect. Therefore, our goal is to understand the intramolecular interactions of amyloid beta precursor peptide with the promising drugs on the base of D-peptides.

This research was funded by the Russian Science Foundation, project number 23-74-00024.

References

1. *Urban A. S.* [et al.]. Structural Studies Providing Insights into Production and Conformational Behavior of Amyloid-β Peptide Associated with Alzheimer's Disease Development // Molecules. 2021. V. 26(10): 2897. DOI: 10.3390/molecules26102897.
2. *Chen G. F.* [et al.]. Amyloid beta: Structure, biology and structure-based therapeutic development // Acta Pharmacologica Sinica. 2017. V. 38(9). P. 1205–123501. DOI: 10.1038/aps.2017.28.
3. *Bocharov E. V.* [et al.]. All - D -Enantiomeric Peptide D3 Designed for Alzheimer's Disease Treatment Dynamically Interacts with Membrane-Bound Amyloid-β Precursors // J. Med Chem. 2021/ V. 64(22). P. 16464–16479. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.1c00632.

УДК 519.634, 577.35

Разработка диффузионно-контролируемой модели кластеризации фибрина

***А. А. Сибирякова*[1,2], *А. И. Лобанов*[1], *С. В. Панюков*[1], *Д. А. Чермошенцев*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]Сколковский институт науки и технологий «Сколтех»

Центральная функция свертывания крови заключается в остановке кровотечения при нарушении целостности сосудистого русла, которое возникает вследствие факторов как внешней, так и внутренней природы. Система свертывания крови, именуемая каскадом (Рис.1), представляет собой сложную сеть биохимических реакций, которые большей частью выполняют регуляторную и управляющую функции для самого главного процесса — образования мономеров фибрина из белка-предшественника, фибриногена, под действием фермента тромбина; этому превращению на схеме соответствует всего лишь одна брутто-реакция, помеченная фиолетовым цветом. Именно с нее начинается многостадийное формирование кровяного сгустка (а именно: сборка полимеров фибрина → агрегация полимеров с образованием трехмерной сети → переход в состояние геля → формирование поперечных сшивок с фактором XIII → налипание форменных элементов крови из потока), закрывающего место повреждения и останавливающего кровопотерю. Остальная часть каскада отвечает за то, чтобы процесс тромбообразования начинался при строго определенных условиях и только локально, в месте повреждения

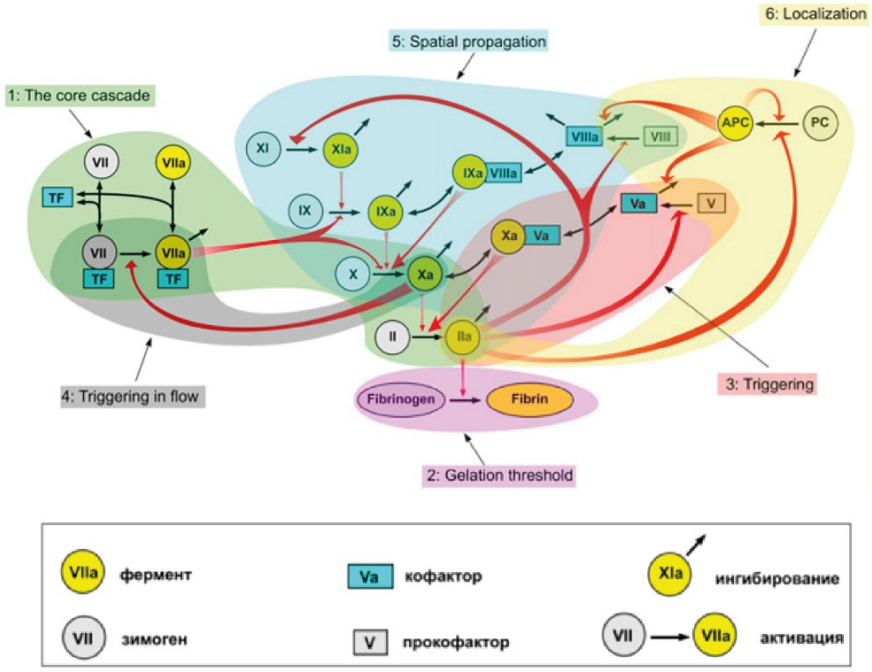


Рис. 1. Основные реакции плазменной системы свертывания крови. Ферментативный катализ и превращения под его действием показаны красными и черными стрелками, соответственно. Остальные условные обозначения указаны в таблице на рисунке. Условные обозначения: TF — тканевой фактор, римскими цифрами обозначены соответствующие факторы свертывания, PC — протеин C, Fg — фибриноген, Fn — фибрин. Два находящихся рядом обозначения факторов свертывания — комплекс, образованный этими факторами (например, Xa Va) [1]

На данный момент существует множество математических моделей разной сложности, описывающих процесс свертывания крови [2]; большинство из них отражает кинетическую составляющую явления и, соответственно, основано на дифференциальных уравнениях [6]. Но при таком подходе существует сразу несколько проблемных моментов, которые относятся как к интерпретации полученных результатов в соответствии с экспериментальными данными, так и к требуемым вычислительным мощностям.

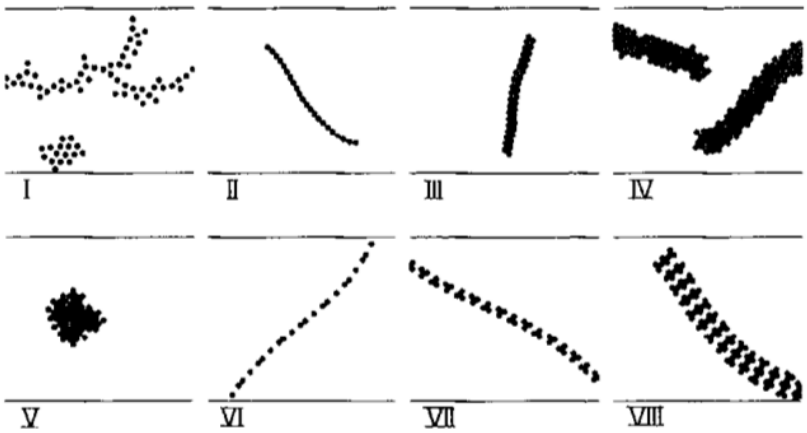


Рис. 2. Схематическое изображение примеров из каждой категории полимерных форм фибрина**.** Формы полимера фибрина, наблюдаемые в электронном микроскопе, подразделяются на 8 категорий, обозначенных римскими цифрами: I — рыхлый продольный агрегат, называемый кластером (60–80% от общего числа); II — сцепленная однонитевая фибрилла (5–20%); III — сцепленная двухнитевая фибрилла (~1%); IV — сцепленная многонитевая фибрилла (5–20%); V — плотный неупорядоченный агрегат (2–12%); VI — сквозная однонитевая фибрилла; VII — двойная шахматном порядке прядь; VIII — несколько прядей в шахматном порядке. VI–VIII вместе составляют 0,2–0,5% [3]

Для полного описания каскада свертывания необходимо рассчитать систему из нескольких десятков дифференциальных уравнений с еще большим количеством параметров; решение такой задачи невозможно без использования суперкомпьютера, так как среднестатистическое вычислительное устройство не справляется с этой проблемой за обозримое время. С другой стороны, решения более грубых моделей плохо интерпретируются и не могут быть использованы в клинической практике. Но основная проблема заключается в том, что они учитывают образование только линейных полимеров фибрина (рис. 2), в то время как Хунцикер [3] показал в своей экспериментальной статье, что существенную долю агрегатов, образующихся из мономеров фибрина, занимают древовидные кластеры, составляющие 60–80% от общего числа. Именно такие неточности приводят к несоответствию между экспериментом и численным результатом.

Целью данной научной работы является создание физической модели полимеризации фибрина in vitro, учитывающей формирование кластеров и влияние этого фактора на прочность полимерной сети и условия ее сборки. Теоретическое описание данного физиологического процесса поможет определить интегральные параметры, влияющие на прочность сети фибрина и другие ее характеристики, что позволит сделать процесс тромбообразования более управляемым и предсказуемым для клиницистов.

Для достижения этой цели наш коллектив развивает сразу несколько подходов, которые по-разному описывают процесс образования кластеров:

1) описание, основанное на моделях статистической физики полимеров, из которого можно вывести распределение как по количеству мономеров в кластере, так и по количеству образованных связей между ними;

2) рассмотрение процесса как оптимизационной задачи и решение ее с помощью алгоритмов оптимизации, а именно квантового алгоритма SimCIM [4];

3) разработка и проведение лабораторных экспериментов, целью которых является получение кластеров in vitro и измерение их основных физических характеристик для валидации и усовершенствования первых двух подходов.

В рамках первого подхода мы рассматриваем ассоциацию мономеров фибрина в качестве процесса необратимой полимеризации, который характеризуется двумя скоростями реакции — $k_{\parallel}$, определяющей вероятность (в единицу времени) продолжения цепочки любой из ветвей кластера, и $k_{\perp}$, определяющей вероятность ветвления. Скорости реакций $k_{\perp}$ и $k_{\parallel}$ зависят от диффузии (трансляционной и поворотной) мономеров из раствора к кластеру и не зависят от энергии их присоединения к кластеру, хотя она полагается много большей, чем тепловая энергия kT.

В начальный момент времени, при $t = 0$, есть только мономеры. В результате необратимых реакций при $t > 0$ они объединяются в кластеры. На каждом шаге к кластеру присоединяется один мономер. Соответственно, кластеры можно описать двумя числами: числом мономеров n и числом активных групп a, которые доступны для присоединения мономера на следующем шаге. При присоединении мономера к активной группе этот сайт оказывается занятым и активная группа передается на только что присоединившийся мономер. Если у кластера $(a — 1) = 1$, то он является линейным полимером, то есть существует взаимно-однозначная связь между количеством активных групп и количеством ветвлений. На рис. 3 схематически изображено образование простейших кластеров с числом мономеров от 2 до 4 и разным числом активных сайтов.

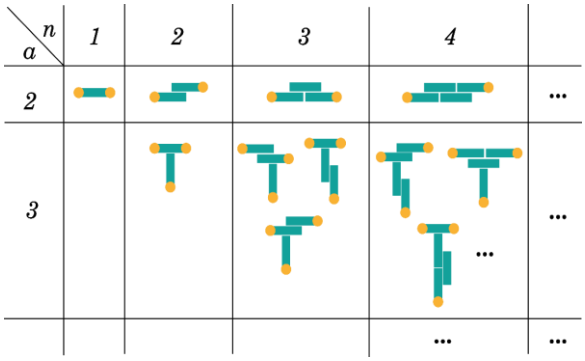


Рис. 3. Простейшие кластеры с определенными значениями (n, a). В первой ячейке (1,2) представлен мономер фибрина, который имеет 2 активных центра D, помеченных оранжевыми кружочками, и два активных центра A. Предполагается, что связи образуются только между центрами A и D

Для концентрации кластеров используются следующие обозначения: $c_n(a)$ — концентрация кластеров, содержащих n мономеров и a активных центров D; следовательно, концентрация мономеров — $c_1(2) = c_1$. В соответствии с этими обозначениями кинетические уравнения для концентрации имеют вид:

$$\frac{dc_n(a)}{dt} = k_{\parallel} a c_{n-1}(a) c_1 + k_{\perp}(a-1) c_{n-1}(a-1) c_1 - (k_{\parallel} + k_{\perp}) a c_n(a) c_1 + I(t)\delta_{n1}, \quad (1)$$

Мономеры тратятся в ходе их присоединения к кластерам и создаются источником, а именно в результате протеолиза фибриногена под действием фермента-тромбина (Рис.1), со скоростью $I(t)$, которая определяется кинетикой данной реакции и для простоты считается известной функцией времени. Решив эти дифференциальные уравнения, можно найти зависимости концентраций кластеров от времени, определить те из них, которые вносят наибольший вклад, и построить общее распределение кластеров по количеству мономеров.

В рамках второго подхода мы представляем необратимую кластеризацию мономеров фибрина в виде оптимизационной задачи и в последующем симулируем ее решение с помощью квантово-вдохновленного алгоритма SimCIM (Simulation of Coherent Ising Machine) [4], работа которого основана на теореме об адиабатических измерениях. Для применения этого метода необходимо, чтобы задача могла быть представлена в форме бинарного квадратичного функционала (в форме QUBO), который, в свою очередь, соответствует физическому гамильтониану Изинга:

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i=1}^{N} \mathbf{h}\sigma_i^x \quad (2)$$

Здесь изначально σ_i — матрицы Паули, J_{ij} — константы связи (coupling constants), $\mathbf{h}$ — магнитное поле. Но в приложении этого энергетического функционала к другим задачам оптимизации предполагается, что в роли σ_i могут выступать любые бинарные переменные, а действительные числа J_{ij} и $\mathbf{h}$ отвечают за величину вклада парных и одиночных слагаемых. В результате, применив алгоритм SimCIM, мы сможем найти решение, близкое к глобальному минимуму этого гамильтониана. Соответственно, реализация данного подхода позволит найти фибриновые кластеры с оптимальной структурой, то есть выгодной с точки зрения энергии.

Третий подход сугубо экспериментальный и выполняет роль доказательного подспорья для первых двух путей решения задачи. Разработка методики проведения лабораторных экспериментов по полимеризации фибрина мотивирована простым желанием отследить эволюцию этого процесса во времени и в зависимости от внешних условий.

Всего в литературе можно найти три типа экспериментов [5], которые обычно проводятся при исследовании кровяного сгустка: моделирование белок-белковых взаимодействий; формирование протофибриллы; исследование структуры геля, то есть сформированной сети фибрина. Для достижения целей нашей научной работы, следуя работам Хунцикера, мы реализуем второй подход, который включает в себя биохимические манипуляции с веществом и анализ процесса с помощью электронного микроскопа.

Литература

1. *Panteleev M. A.* [et al.]. Task-oriented modular decomposition of biological networks: trigger mechanism in blood coagulation // Biophys J. 2010. V.98(9). P. 1751–1761. DOI: 10.1016/j.bpj.2010.01.027
2. *Шибенко А. М.* Моделирование формирования фибринового сгустка и исследование влияния потока крови на этот процесс: автореф. дис. ... канд. биол. наук: 03.00.02. М., 2009.
3. *Hunziker E. B.* [et al.] Molecular morphology of fibrin monomers and early oligomers during fibrin polymerization // J. Ultrastruct. Mol. Struct. Res. 1988. V.98(1). P. 60–70. DOI: 10.1016/s0889-1605(88)80934-0.
4. *Tiunov E. S.* [et al.]. Annealing by simulating the coherent Ising machine // Opt Express. 2019. V. 27(7). P. 10288–10295. DOI: 10.1364/OE.27.010288.
5. *Weisel J. W.* [et al.]. Fibrin Formation, Structure and Properties // Subcell Biochem. 2017. V.82. P. 405–456. DOI: 10.1007/978-3-319-49674-0_13.
6. *Kelley M. A.* [et al.]. Mathematical modeling to understand the role of bivalent thrombin-fibrin binding during polymerization // PLoS Comput Biol. 2022. V. 18(9): 1010414. DOI: 10.1371/journal.pcbi.1010414.

УДК 579.258

Изучение механизма регуляции экспрессии гена ферритина А в клетках *Escherichia coli*

А. Д. Гребенникова, С. В. Баженов, И. В. Манухов

Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ферритин и белки ферритинового семейства выполняют важную роль в клетке, обеспечивая процессы окисления и запасания железа [1]. Гены ферритина присутствуют в геномах всех видов живых организмов, включая бактерии, археи и большинство эукариотов. Известно, что в клетках *Escherichia coli* активация экспрессии гена ферритина А (*ftnA)* происходит при взаимодействии железо-зависимого активатора транскрипции Fur с Fe^{2+} за счет его связывания с ДНК в промоторной области гена *ftnA* и конкурентного вытеснения репрессора HNS [2]. Ранее было обнаружено, что экспрессия гена *ftnA* может индуцироваться в ответ на окислительный стресс, вызванный перекисью водорода.

Целью данной работы являлось сравнение индукции промотора гена *ftnA* в клетках *E. coli* в зависимости от содержания белка FtnA в клетках. Если клетка индуцирует его экспрессию в ответ на окислительный стресс, то логичным будет предположение, что FtnA должен защищать клетку и снижать окислительный стресс. В частности, это может быть реализовано за счет уменьшения концентрации Fe^{2+} и предотвращении реакции Фентона в клетке. Для проведения эксперимента использовали клетки *E. coli* MG1655 дикого типа, мутантные BW25113ΔftnA с делецией по гену *ftnA* и B233H207ftnA со встроенным перед рамкой считывания *ftnA* сильным конститутивным промотором P_{H207}. Клетки перечисленных штаммов трансформировали биосенсорной плазмидой pFtnA-lux, содержащей гены *luxCDABE P. luminescens* под контролем промотора P_{IftnA} *E. coli*, для последующего определения активности промотора по светимости трансформантов в присутствии различных концентраций перекиси в среде.

Амплитуда активации промотора P_{ftnA} в клетках дикого типа была умеренной (3–4-кратная активация при концентрации перекиси 100 мкМ; и почти 10-кратная активация при 1 мМ перекиси), в клетках с постоянной усиленной экспрессией *ftnA* амплитуда активации была снижена (2–3-кратная для 100 мкМ перекиси; и 3–4-кратная при 1 мМ), а в клетках с делетированным геном *ftnA* усиление люминесценции при добавлении 100 мкМ перекиси было значительно сильнее (6–7-кратное), а при добавлении 1 мМ перекиси клетки погибали и светимость пропадала.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что наличие и количество ферритина влияет на устойчивость клетки к перекиси водорода. Чем больше ферритина, тем меньше амплитуда этой активации, а полное отсутствие FtnA приводит к повышенной чувствительности к перекиси и гибели клеток при концентрациях перекиси в 1 мМ, при которых обычно наблюдается снижение люминесценции клеток лишь в 2-3 раза, но они остаются жизнеспособными.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 22-74-10047.

Литература:

1. *Sudarev V. V.* [et al.]. Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // Int. J. Biol. Macromol. 2023. V. 224. P. 319-343.
2. *Nandal A.* [et al.]. Induction of the ferritin gene (*ftnA*) of *Escherichia coli* by Fe(2+)-Fur is mediated by reversal of H-NS silencing and is RyhB independent // Mol. Microbiol. 2010. V. 75. P. 637–657.

УДК 577.22, 577.322.63

Исследование архитектуры светособирающих комплексов LH2 и LH1-RC из пурпурной серной бактерии *Ectothiorhodospira haloalkaliphila*

***А. Д. Бурцева*[1,2], *Т. Н. Баймухаметов*[3], *И. О. Илясов*[2], *М. А. Большаков*[4], *А. А. Ашихмин*[4], *К. М. Бойко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт биохимии им. А. Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН
[3]Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”
[4]Институт фундаментальных проблем биологии РАН, ФИЦ “Пущинский научный центр биологических исследований” РАН

Фотосинтез является одним из важнейших процессов биосферы, в ходе которого происходит превращение энергии света в энергию химических связей. Фотосинтезирующие бактерии обладают одной из наиболее простых и стабильных систем для сбора и эффективной трансформации солнечной энергии по сравнению с другими фотосинтезирующими организмами. Основными компонентами фотосинтетического аппарата бактерий являются светособирающие пигмент-белковые комплексы (LH - Light-harvesting complexes) и фотохимически активный реакционный центр (RC — Reaction Center), в котором происходит первичное запасание энергии. Выделяют две группы светособирающих комплексов согласно их расположению относительно RC: прицентровые комплексы (LH1) и периферийные (LH2) комплексы. RC находится внутри LH1 и образует с ним т. н. коровый комплекс LH1-RC.

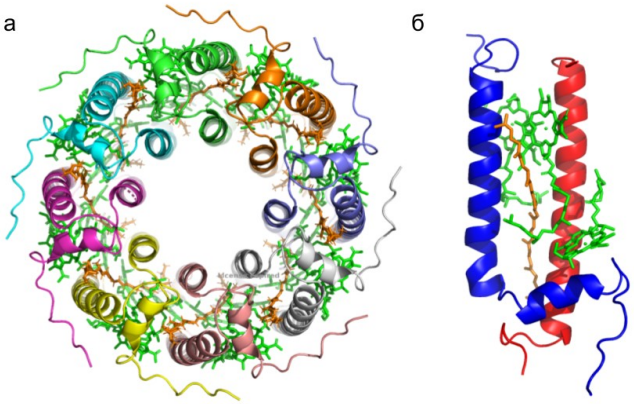


Рис. 1. Структура октамера (*а*) и субъединицы (*б*) комплекса LH2 из пурпурной серной бактерии *E. haloalkaliphila*. Молекулы БХл показаны зеленым цветом, каротиноиды — оранжевым, α- и β-полипептиды — синим и красным цветом соответственно

Для пурпурных бактерий характерны светособирающие комплексы с круговой организацией из одинаковых субъединиц, содержащих полипептиды, бактериохлорофилл (БХл), а также каротиноиды. Известно всего несколько видов фотосинтезирующих бактерий, для которых биосинтез каротиноидов можно ингибировать на 95–99%, сохранив при этом полный набор светособирающих комплексов [1]. Так, для серной пурпурной бактерии *Ectothiorhodospira haloalkaliphila* были получены уникальные бескаротиноидные комплексы LH1 и LH2, структуры которых могут пролить свет на функциональную роль каротиноидов [1]. Кроме того, на сегодняшний день, в отличие от несерных пурпурных бактерий, для серных бактерий установлена единственная пространственная структура LH2 (2.4 Å) [2] и четыре структуры LH1-RC [3–6]. В рамках настоящей работы методом криоэлектронной микроскопии получены пространственные структуры комплексов LH2 и LH1-RC из пурпурной серной бактерии *E. haloalkaliphila* с разрешением 1.7 Å и 2.5 Å соответственно (рис. 1*а*, 2). LH2 представляет собой октамер, каждая из субъединиц которого содержит α- и β-полипептиды, нековалентно связывающие три молекулы БХл и одну молекулу

каротиноида (рис. 1*б*). Однозначно определены последовательность полипептидов и тип каротиноидов в комплексе, а также проведен сравнительный анализ с единственной известной структурой LH2 из пурпурной серной бактерии *Marichromatium purpuratum*. Комплекс LH1 из *E. haloalkaliphila* состоит из 16 идентичных субъединиц, устроенных аналогичным образом (рис. 2). Внутри комплекса находится RC, состоящий из цитохрома *c* и полипептидных цепей, которые связывают различные кофакторы, такие как БХл, феофитин, каротиноиды и ионы железа. LH1-RC имеет консервативную архитектуру, схожую со структурами из других пурпурных серных бактерий.

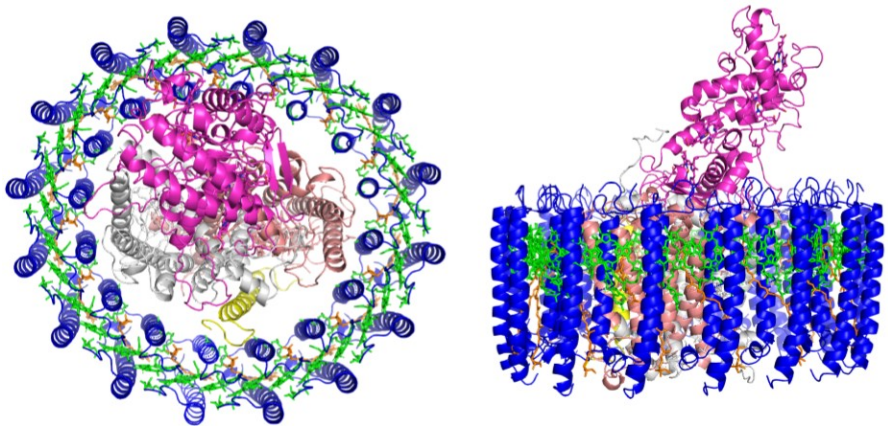


Рис.2. Структура комплекса LH1-RC из пурпурной серной бактерии *E. haloalkaliphila*. В 16-и субъединичном LH1 молекулы БХл показаны зеленым цветом, каротиноиды — оранжевым, полипептиды — синим. В RC цитохром *c* показан фиолетовым цветом, а полипептидные субъединицы — розовым, белым и желтым соответственно

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-74-00062).

Литература

1. *Ashikhmin A.* [et al.]. The LH2 complexes are assembled in the cells of purple sulfur bacterium Ectothiorhodospira haloalkaliphila with inhibition of carotenoid biosynthesis // Photosynth. Res. 2014. V. 119. P. 291–303.
2. *Alastair T.* [et al.]. The 2.4 Å cryo-EM structure of a heptameric light-harvesting 2 complex reveals two carotenoid energy transfer pathways // Sci. Adv. 2021. V. 7(7): 4650.
3. *Yu L. J.* [et al.]. Structure of photosynthetic LH1–RC supercomplex at 1.9 Å resolution // Nature. 2018. V. 556. P. 209–213.
4. *Tani K.* [et al.]. Cryo-EM structure of a Ca2+-bound photosynthetic LH1-RC complex containing multiple αβ-polypeptides // Nat. Commun. 2020. V. 11: 4955.
5. *Tani K.* [et al.]. A Ca2+-binding motif underlies the unusual properties of certain photosynthetic bacterial core light-harvesting complexes // JBC. 2022. V. 298 (6): 101967.
6. *Tani K.* [et al.]. High-resolution structure and biochemical properties of the LH1–RC photocomplex from the model purple sulfur bacterium, Allochromatium vinosum // Commun. Biol. 2024. V. 7: 176.

УДК 577.352.53

Функциональная характеризация микробного родопсина с DTG/DTS мотивом из бактерии *Methylobacterium populi*

А. М. Свистунов, А. А. Привалов, Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович, Ф. М. Цыбров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время оптогенетика является одной из активно развивающихся и востребованных методик. Путем светового воздействия на генно-модифицированные возбудимые клетки возможно изменять их функции, влияя на потенциал мембраны данных клеток [1].

Основным инструментом оптогенетики являются микробные родопсины — светочувствительные, семиспиральные трансмембранные белки. Функционально многие микробные родопсины обладают транспортной функцией, то есть являются ионными каналами, ионными и протонными помпами. Одним из способов классифицировать микробные родопсины является анализ последовательности ключевых аминокислот (мотив). Обычно схожие по мотиву микробные родопсины обладают одной и той же функцией.

Недавно была идентифицирована новая филогенетическая группа микробных родопсинов с мотивом DTG/DTS, которые прокачивают протон наружу клетки, как классические протонные помпы [2]. Данные протонные помпы прокачивают протон в кислых условиях, и неактивны в щелочных, что является противоположным привычным протеородопсинам [3]. Вопрос о том, могут ли микробные родопсины DTG/DTS семейства обладать прокачкой других ионов остается открытым. Утверждается, что микробный родопсин из *Methylobacterium populi* (MpR), прокачивает ионы Li^+ и Na^+ [4].

В данной работе исследуются функциональные свойства MpR — микробного родопсина с DTG/DTS мотивом. Для данных исследований были использованы два метода: измерение pH под действием света в суспензии клеток *Escherichia coli*, экспрессирующих ген MpR, и электрофизиологическое исследование методом patch-clamp whole-cell. Исследовалась функция белка дикого типа и мутанта E32Q/E33Q, про который было указано, что он обладает протонной прокачкой [4].

При исследовании первым методом ген белка был экспрессирован в *E. coli*. Далее были проведены измерения изменения pH в суспензии клеток, взвешенных в солевом растворе, под действием света. При исследовании методом patch-clamp ген белка был экспрессирован в клеточной линии SH-SY5Y, исследования проведены в различных условиях по внеклеточному и внутриклеточному pH.

Результаты экспериментов показывают, что MpR функционально не отличается от остальных протонных помп с DTG/DTS мотивом.

Литература

1. *Ernst O. P.* [et al.]. Microbial and animal rhodopsins: structures, functions, and molecular mechanisms // Chem. Rev. 2014. V. 114. P. 126–163.
2. *Harris A.* [et al.]. A new group of eubacterial light-driven retinal-binding proton pumps with an unusual cytoplasmic proton donor // Biochim. Biophys. Acta, Bioenerg. 2015. V. 1847. P. 1518–1529.
3. *Okhrimenko I. S.* [et al.]. Mirror proteorhodopsins // Commun. Chem. 2023. V. 6: 88.
4. *Cho S. G.* [et al.]. Discovery of a new light-driven Li^+/Na^+-pumping rhodopsin with DTG motif // J. Photochem. Photobiol. B: Biol. 2021. V. 223: 112285.

УДК 579.258

Активация *lux*-оперона бактерий рода *Photorhabdus*

***В. В. Фомин*[1], *С. В. Баженов*[1], *В. О. Матвеева*[1], *И. В. Манухов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Считается, что *lux*-оперон, кодирующий белки люминесценции бактерий рода *Photorhabdus*, является конститутивным [1]. Поэтому данный оперон используется как неспецифичный бактериальный биосенсор для измерений интегральной токсичности [2]. Цель данной работы - исследование регуляции *lux*-оперона бактерий рода *Photorhabdus* и его возможное применение в биотехнологии.

Исследования выделенного в Московской области природного штамма *Photorhabdus temperata* и клонированного из штамма *Photorhabdus luminescens* ZM1 *lux*-оперона [3] в гетерологичной системе *Escherichia coli* показали активацию экспрессии *lux*-оперона при росте температуры от 23°C до 34°C и 42°C соответственно. Активация экспрессии *lux*-оперона наблюдается на транскрипционном уровне, что подтверждено RT-PCR. При инкубации в среде с добавлением этанола, экспрессия *lux*-оперона увеличивается в природном штамме P. *temperata*, но не в клетках *E. coli*. Это можно объяснить тем, что шапероны в гетерологичной системе *E. coli* не узнают промотор *lux*-оперона в отличие от нативного окружения в бактериях рода *Photorhabdus*. Также это может быть связано с плавлением вторичной структуры мРНК *lux*-оперона. Чтобы протестировать данную гипотезу, исследовали экспрессию *lux*-оперона в штаммах *E. coli* дефектных по транскрипционным факторам, активирующимся в условиях высоких температур: *rpoH* и *rpoE*. В итоге при высоких температурах индукция *lux*-оперона в дефектных штаммах *E. coli* сохраняется, что свидетельствует о наличии шпильки мРНК, хотя не объясняет экспрессионную активацию в ответ на добавление спирта в среду к клеткам P. *temperata*.

В итоге показано, что экспрессия *lux*-оперона бактерий рода *Photorhabdus* зависит от температурных условий и от процентного содержания спирта в среде в нативных клетках *Photorhabdus*. Дальнейшее исследование механизмов регуляции *lux*-оперона может послужить основой для конструирования биосенсора специфичного к определенному типу клеточного стресса.

Работа поддержана грантом РНФ 22-14-00124

Литература

1. *Lojek A.* [et al.]. Comparison of the bioluminescence of *Photorhabdus* species and subspecies type strains Folia Microbiol. 2004. V. 49. P. 539–542.
2. *Manukhov I.* [et al.]. Action of 1,1-dimethylhydrazine on bacterial cells is determined by hydrogen peroxide Mutat. Res. Toxicol. Environ. Mutagen. 2007. V. 634. P. 172–176.
3. *Zavil'gelskii G. B.* [et al.]. Cloning and expression of the *lux*-operon of *Photorhabdus* luminescens, strain Zm1: nucleotide sequence of *luxAB* genes and basic properties of luciferase Genetika. 2000. V. 36. P. 322–330.

УДК 577.322

Профиль липидной специфичности основного регуляторного сайта термочувствительного ионного канала TRPV1 (по данным вычислительного эксперимента)

***И. И. Веретененко*[1,2], *Ю. А. Трофимов*[1,3], *Р. Г. Ефремов*[1,2,4]**

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2] Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН
[3] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[4] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Катион-проницаемый неселективный ионный канал TRPV1 экспрессируется на плазматической мембране сенсорных нейронов и принимает участие в процессах температурной чувствительности и ноцицепции, активируясь в ответ на увеличение температуры (>42°C) и при воздействии ваниллоид-подобных соединений — капсаицина (компонента острого перца чили) или его функционального аналога резинифератоксина [1]. С помощью криоэлектронной микроскопии (крио-ЭМ) был обнаружен сайт связывания капсаицина — так называемый «ваниллоидный карман» (Vanilloid Binding Pocket, VBP), расположенный на поверхности трансмембранного (ТМ) домена белка. В отсутствие лиганда в данном сайте находится липид фосфатидилинозитол (PI), ацильные цепи которого располагаются в образованной ТМ спиралями S3, S4 и S5 гидрофобной полости, а полярная головка - в гидрофильном окружении с внутриклеточной стороны мембраны (рис. 1*А*) [2]. Кроме того, показано [3], что в температурно-опосредованной активации другого представителя семейства TRP каналов, TRPV3, может участвовать липид, связывающийся в аналогичном VBP сайте: предполагается, что данный липид работает как т.н. «плавкий предохранитель», стабилизирующий структуру TRPV3 в закрытом состоянии при низкой температуре и покидающий сайт при ее повышении. Высокий уровень гомологии и структурное сходство сайтов TRPV1 и TRPV3 позволяют предположить, что PI в VBP также может играть роль в температурной чувствительности TRPV1. Понимание структурных и функциональных особенностей липид-белкового взаимодействия в VBP позволит направленным образом влиять на температурную активацию каналов семейства TRPV. Целью данной работы является изучение методами молекулярной динамики (МД) структуры и динамических свойств сайта VBP TRPV1 и механизмов его селективности к липиду PI.

Расчет МД проводили в программном пакете Gromacs 2022.5 и силовом поле CHARMM36. Модельные системы включали в себя крио-ЭМ структуру канала TRPV1 крысы (*Rattus norvegicus)* в закрытом состоянии (PDB ID 7L2P) [4], помещенную в гидратированный бислой, близкий по составу к мембране окончаний сенсорных нейронов (50% фосфатидилхолин (PC), 25% фосфатидилэтаноламин (PE), 25% холестерин) [5]. В VBP каждой из четырех субъединиц TRPV1 с помощью молекулярного докинга в программе AutoDock Vina помещали фосфолипиды одного из пяти наиболее распространенных типов: PI, PC, PE, фосфатидилсерин (PS), фосфатидилглицерин (PG). Для каждого типа липида рассчитывали траекторию МД длительностью 500 нс. Полученные в МД состояния систем использовали как стартовые для расчета свободной энергии связывания липидов с VBP (ΔG). Вычисления проводили методом возмущения свободной энергии (FEP), с использованием программ Gromacs и Flamel. ΔG определяли как разность между значениями свободной энергии взаимодействия липида с остатками VBP и с мембранным окружением, состоящим из липидов PC.

Анализ распределения свободного (доступного липиду) объема в VBP TRPV1 показал, что в нижней части сайта, обращенной к внутренней стороне мембраны, ТМ спирали S3, S4 и S5 образуют характерное сужение («горлышко»), в котором локализуется фосфогруппа липида, образующая водородные связи (h-связи) с остатками S512 (ТМ спираль S3) и R557 (ТМ спираль S4) (рис. 1А,Б). Ниже, на уровне полярной головки липида, сайт становится более широким, что позволяет головке принимать более

выгодные конформации с образованием большего числа h-связей. В течение МД молекула PI образовывала с VBP 7±1 h-связей, в то время как PS и PE - 6±1, а PC и PG - 3±1. Головки всех липидов наиболее часто контактировали с остатком E570 на S4-S5 линкере и остатком Q700 на TRP-спирали, а PI и PS дополнительно образовывали h-связи с расположенным на N-линкере R409. Меньшее число h-связей PC и PG по сравнению с другими липидами обусловлено наличием у их головок меньшего числа потенциальных доноров/акцепторов h-связи: 0 - у PC, 2 - у PG (две OH^- группы) против 5 OH^- групп у PI.

Расчеты свободной энергии показали, что для PI величина ΔG, по крайней мере, на 10 ккал/моль меньше по сравнению с другими типами липидов, что согласуется с наблюдаемой в экспериментах селективностью сайта VBP. Анализ данных моделирования позволил построить т.н. «профили липидной специфичности» указанного важнейшего регуляторного сайта канала и заключить, что механизм селективности VBP определяется не только структурой сайта и числом полярных контактов белок-липид, но и конкуренцией VBP с мембраной за липид: например, несмотря на наименьшую среди всех типов липидов энергию взаимодействия PS с остатками VBP (наиболее сильное взаимодействие с сайтом), величина ΔG для PS близка к нулю, т.е. молекуле PS одинаково выгодно сохранять как мембранное, так и белковое окружение. Тогда как преимущественное связывание PI в VBP TRPV1 может быть объяснено более выгодным окружением его головки в сайте, обусловленным высокой плотностью полярных контактов с белком, по сравнению с мембраной, где число h-связей стерически ограничено 2-3 соседними липидами, которые могут одновременно находиться рядом с PI.

Дальнейшим развитием работы является анализ структуры и свойств (включая профили липидной специфичности) VBP других TRPV каналов, а также дизайн и экспериментальная проверка мутаций, способных обеспечить изменение аффинности и селективности сайта VBP к липидам (например, по образующему «горлышко» остатку S512). Это, в свою очередь, должно повлиять на чувствительность TRPV1 к температуре и молекулам-агонистам. Детальное понимание механизма связывания/высвобождения липидов в функционально важном сайте VBP, наряду с оценкой тонкого баланса обмена липидами между мембраной и сайтом и роли данных процессов в активации каналов TRPV открывает новые перспективы в разработке лекарственных препаратов-анальгетиков, а также в развитии экспериментальных методов термогеники, позволяющих управлять работой возбудимых клеток с помощью изменения температуры.

Работа поддержана грантом РНФ 23-14-00313.

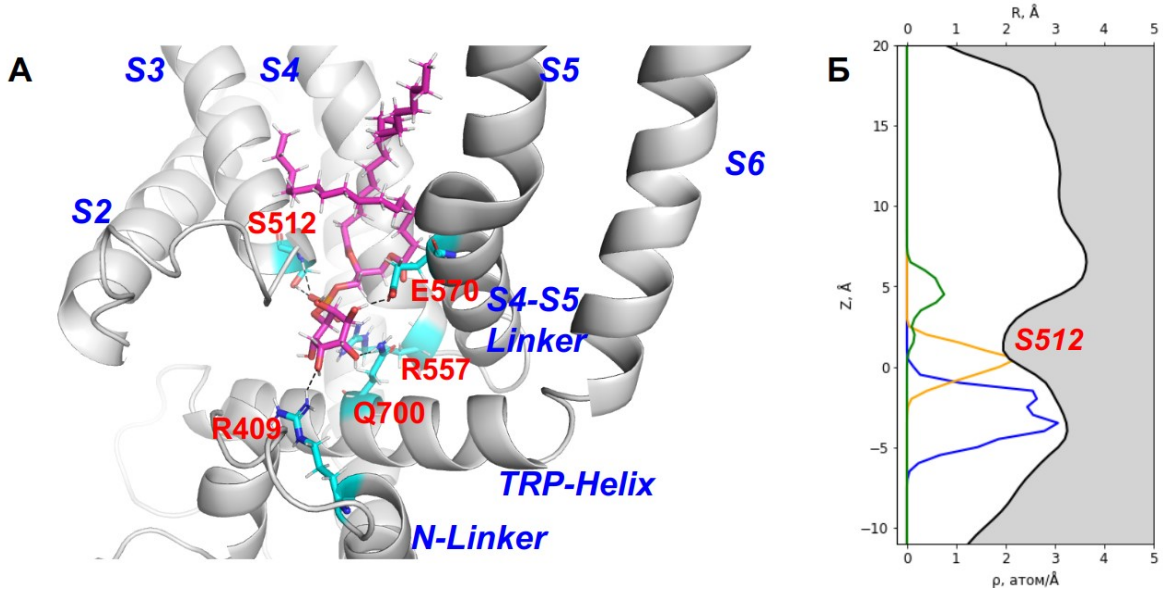


Рис. 1. *А* — структура ваниллоид-связывающего сайта (VBP) TRPV1 в комплексе с липидом фосфатидилинозитолом (PI) (PDB ID 7L2P). Белок показан в ленточном представлении, обозначены формирующие сайт спирали (синий) и ключевые остатки сайта (красный), PI показан пурпурным цветом. *Б* — профиль радиуса свободного (доступного липиду) объема TRPV1 вдоль оси сайта (серый) и плотности атомов PI: полярной головки (синий), фосфогруппы (оранжевый) и атомов кислорода карбонильных групп (зеленый), усреднение по 500 нс МД-траектории. Красным цветом отмечено положение ключевого остатка S512, образующего сужение в доступном липиду объеме (т.н. «горлышко» сайта)

Литература

1. *Caterina M.* [et al.] The capsaicin receptor: a heat-activated ion channel in the pain pathway // Nature. 1997. V. 389(6653). P. 816–824. DOI: 10.1038/39807.

2. *Nadezhdin K. D.* [et al.] Extracellular cap domain is an essential component of the TRPV1 gating mechanism // Nat. Comm. 2021. V. 12(1). P. 2154. DOI: 10.1038/s41467-021-22507-3.
3. *Nadezhdin K. D.* [et al.] Structural mechanism of heat-induced opening of a temperature-sensitive TRP channel // Nat. Struct. Mol. Biol. 2021. V. 28(7). P. 564–572. DOI: 10.1038/s41594-021-00615-4.
4. *Zhang K.* [et al.] Structural snapshots of TRPV1 reveal mechanism of polymodal functionality // Cell. 2021. V. 184 (20). P. 5138–5150.e12. DOI: 10.1016/j.cell.2021.08.012.
5. *Calderon R. O.* [et al.] Lipid Composition of Neuronal Cell Bodies and Neurites from Cultured Dorsal Root Ganglia // J. Neurochem. 1995. V. 64(1). P. 424–429. DOI: 10.1046/j.1471-4159.1995.64010424.x.

УДК 577.322

Влияние высокого давления Ar и Kr на структуру вирусного родопсина ОЛПВР1

В. А. Поспелов, С. С. Бухдрукер, В. И. Борщевский

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Вирусные родопсины - две филологенетически различные группы микробных родопсинов, суперсемейства семиспиральных трансмембраннных белков. Крупные ядерно-цитоплазматические ДНК-содержащие вирусы (NCLDV), в которых впервые обнаружены родопсины этого семейства, регулируют фототаксис и динамику популяции фитопланктона, заражая его. Поэтому изучение работы и особенностей NCLDV представляет важную задачу. Ранее было показано, что вирусные родопсины из *Organic Lake phycodnavirus*, являются активируемыми светом Na/K каналами и непроницаемы для Ca [1]. Такие специфические катионные каналы являются необходимыми инструментами для задач оптогенетики.

Благородные газы, несмотря на низкую реактивность, могут взаимодействовать с белками. Взаимодействия основаны на силах Лондона, а энергия связи способна достигать нескольких ккал/моль. Взаимодействие инертных газов с мембранными белками активно изучается, поскольку, во-первых, это расширяет наше представления об анестезирующем эффекте Xe, Kr и Ar [2], и, во-вторых, расширяет наше понимание работы мембранных белков [3] и важности аллостерических взаимодействий при изменении их конформаций [2].

В данной работе было изучено влияние высокой атмосферы Kr и Ar на закристаллизованный вирусный родопсин ОЛПВР1.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-03-2024-117, проект FSMG-2024-0012).

Литература

1. *Zabelskii D.* [et al.] Viral rhodopsins 1 are an unique family of light-gated cation channels //Nature communications. 2020. V. 11(1): 5707. DOI: 10.1038/s41467-020-19457-7.
2. *Melnikov I.* [et al.] High-pressure crystallography shows noble gas intervention into protein-lipid interaction and suggests a model for anaesthetic action //Communications Biology. 2022. V. 5(1) : 360. DOI: 10.1038/s42003-022-03233-y.
3. *Sauguet L.* [et al.] Structural basis for xenon inhibition in a cationic pentameric ligand-gated ion channel //PLoS One. 2016. V. 11(2): e0149795. DOI: 10.1371/journal.pone.0149795.

УДК 577.25, 577.44.2

Моделирование комплексов AMPA-рецепторов со светочувствительными блокаторами

***Г. А. Курницкий*[1,2], *П. Е. Волынский*[1,2], *А. А. Василевский*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

AMPA-рецепторы — группа ионотропных глутаматных рецепторов, ответственных за быструю передачу возбуждения между нейронами в центральной нервной системе. Для наиболее распространенной субъединицы GluA2 этих рецепторов характерно мРНК-редактирование в так называемом «Q/R-сайте», и при замене Q607R рецептор становится неспособен пропускать катионы Ca^{2+}. Если же мРНК-

редактирование не происходит, AMPA-рецепторы остаются кальций-проницаемыми, с ними связывают развитие ряда заболеваний. Отличительной особенностью таких рецепторов является чувствительность к блокированию эндогенными полиаминами и природными и синтетическими ацилполиаминами. Недавно в сотрудничестве с коллегами из ИБХ РАН и ИЭФБ РАН были разработаны светочувствительные ацилполиамины — поровые блокаторы AMPA-рецепторов, содержащие замещенный азобензол в качестве фотопереключаемой группы. На свету происходит изомеризация транс-изомера азобензола в цис-изомер, что снижает активность блокатора. Эта разработка перспективна для избирательного воздействия на AMPA-рецепторы, однако полученные в настоящее время соединения не демонстрируют высокой эффективности фотопереключения. Мы решили использовать методы молекулярного моделирования для рационального предсказания модификаций, которые бы позволили улучшить имеющиеся блокаторы.

Мы провели молекулярный докинг наиболее эффективных блокаторов в транс-конфигурации в пору AMPA-рецепторов. Выбранный нами протокол докинга в программном пакете AutoDock Vina дал результаты, сходные с экспериментальными данными относительно положения ацилполиаминов в поре рецептора [1]. Аналогичным образом мы осуществили докинг блокаторов в цис-конфигурации. Затем мы провели молекулярную динамику (МД) полученных комплексов с использованием программного пакета GROMACS и силового поля AMBER99sb-ILDN. Лиганды для МД подготовили с помощью программы ACPYPE, топологию двойной связи для силового поля определяли с помощью программы GAMESS. Длина МД-траектории для каждой системы составляла 500 нс. Для анализа контактов между лигандами и рецептором мы использовали программную среду Impulse [2] и язык программирования Python. МД позволила выявить ключевые взаимодействия лигандов с рецептором, различия между лигандами с разной длиной полиаминного хвоста наблюдаются на уровне «электростатического пояса» в районе остатка D590. Анализ траекторий МД фотопереключателей в транс- и цис-конфигурации выявил различия в стекинг-взаимодействиях с ароматическими аминокислотами «гидрофобного кармана» рецептора, которые отсутствуют в экспериментальных структурах комплексов. Полученные данные позволяют предложить модификации для разработки лиганда, аффинного к рецептору исключительно в транс-конфигурации.

Литература

1. Twomey E. C. [et al.]. Mechanisms of Channel Block in Calcium-Permeable AMPA Receptors // Neuron. Cell Press, 2018. V. 99(5). P. 956–968.e4. DOI: 10.1016/j.neuron.2018.07.027.
2. Krylov N. A., Efremov R. G. libxtc: an efficient library for reading XTC-compressed MD trajectory data //BMC Res. Notes. 2021. V. 14(1)): 124. DOI: 10.1186/s13104-021-05536-5.

УДК 577.23, 577.352

Экофизиологическое значение актинородопсинов

Д. В. Сидоров, С. М. Бухалович

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Актинобактерии и другой бактериопланктон широко представлены в различных водоемах. Некоторые из этих микроорганизмов могут быть фототрофами, из-за наличия генов актинородопсинов (ActR) [1]. Интересно заметить то, что у многих таких организмов, при наличии даже полностью функционального родопсина в геноме, отсутствует синтез каротиноидов и ретиналя в частности, т. е. родопсин может оставаться в нефункциональной форме, если нет иных источников ретиналя [2].

В данной работе мы впервые успешно экспрессировали родопсин ActR из *Actinobacterium* MWH-Uga1 в *E. coli* C41 (DE3), а также показали, что он обладает свойствами прямой протонной помпы, так как наблюдалось светозависимое подкисление среды в суспензии *E. coli*, экспрессирующих ActR. Также нами был проведен анализ организмов, в которых закодированы гены ActR на предмет наличия второго родопсина и ферментов синтеза каротиноидов, проанализированы соседние гены родопсинов.

Далеко не все штаммы, несущие ген актинородопсина, аннотированы полностью. Однако, из тех бактерий, геном которых полностью секвенирован, не во всех присутствует синтез каротиноидов, исходя из аннотации генома [1]. В общем случае отсутствие аннотированных ферментов синтеза каротиноидов не говорит об отсутствии эндогенных каротиноидов, то есть аннотирование может быть не верно или ферменты будут исполнять другие функции. Однозначно решить вопрос наличия эндогенных каротиноидов можно только при культивировании. При этом, сообщается о культивируемых штаммах, несущих ген актинородпсина, но не производящих каротиноиды [2].

Интересно отметить, что зачастую вторым, или даже третьим родопсином в геноме является гелиородопсин [1]. Функции большинства гелиородопсинов неизвестны, но предполагается, что они могут выполнять, например, фоторецепторную функцию [3].

Можно предположить, что гены данных родопсинов появились в результате горизонтального переноса у тех бактерий, которые не синтезируют каротиноиды или являются функционирующими при получении каротиноидов извне (факультативный фототроф). Вопрос появления генов родопсинов в данных бактериях остается открытым, так как не все они культивируемы, а без этого невозможно однозначно определить имеется ли у штамма эндогенный кофактор. Не говоря о том, что зачастую для таких штаммов геном секвенирован не полностью.

Литература

1. *Dwulit-Smith J. R.* [et al.]. acI Actinobacteria assemble a functional actinorhodopsin with natively synthesized retinal // Applied and Environmental Microbiology. 2018. V. 84(24): e01678-18.
2. *Maresca J. A.* [et al.]. Light modulates the physiology of nonphototrophic Actinobacteria // Journal of Bacteriology. 2019. V. 201(10): 10.1128/jb. 00740-18.
3. *Kovalev K.* [et al.]. High-resolution structural insights into the heliorhodopsin family // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2020. V. 117(8). P. 4131–4141.

УДК 577.22

Исследование образования и определение размеров инактивированного актина с использованием малоуглового рентгеновского рассеяния

***Д. Д. Куклина*[1,2], *О. И. Поварова*[2], *Е. А. Дронова*[2], *Ю. А. Антифеева*[2], *К. К. Туроверов*[2], *И. М. Кузнецова*[2], *Ю. Л. Рижиков*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2] Институт цитологии РАН
[3] Объединенный институт ядерных исследований

Актин — глобулярный белок, который играет существенную роль в функционировании эукариотических клеток. Он является основным компонентом цитоскелета, обеспечивающим поддержание формы клетки и ее способности к движению. Актин присутствует в основном в цитоплазме, но в небольших количествах также наблюдается в ядре клетки. В зависимости от условий, актин может быть функционально активен либо в мономерной, либо в фибриллярной форме, при этом мономер принято называть G-актином, от англ. *globular*, а фибриллярный актин — F-актином. Образование нативной пространственной структуры G-актина опосредовано шапероном Hsp70 и префолдином. В полости шаперонина CCT происходит посттрансляционная АТФ-зависимая модификация полипептидной цепи, в результате которой возникает доменная структура, формируется активный центр, происходит встраивание молекул АТФ и иона Mg^{2+} (*in vitro* используется Ca^{2+}), которые стабилизируют структуру [1]. Такая форма актина находится в квазистационарном состоянии и кинетически стабильна [2].

Аминокислотная последовательность полипептидной цепи актина определяет другое, термодинамически стабильное, состояние. Ранее с помощью триптофановой флуоресценции было показано, что при отщеплении от G-актина АТФ и/или ионов Mg^{2+} образуются темодинамически стабильные олигомеры полипептидной цепи актина [2, 3]. Такая форма актина получила название инактивированного актина (I-актин) в силу невозможности выполнять функции, присущие хорошо изученным G- и F-актинам. Переход актина в инактивированное состояние может происходить в присутствии хелатирующих или денатурирующих агентов, при нагревании или спонтанно при длительной инкубации [2, 3].

В данной работе рассматривается структура инактивированного актина, полученная путем длительной инкубации при температуре +4°C. На рис. 1 в качестве референса приведены данные малоуглового рассеяния для G-актина, аппроксимация которых с помощью программы CRYSOL (PDB ID: 3HBT) подтверждает, что образец действительно представляет собой мономеры G-актина (χ^2 = 1,037). Данные МУРР, полученные для образца через неделю инкубации, с хорошей точностью могут быть представлены как суперпозиция рассеяния мономеров актина и олигомеров с максимальным характерным размером 120 Å. Предположительно, наблюдаемые олигомеры являются димерами с расстоянием между центрами протомеров 51 ± 14 Å, а их объемная доля составляет (46 ± 21) %. Через 4 месяца инкубации, была произведена эксклюзионная хроматография. В дальнейших измерениях использовалась пиковая фракция. К

этому моменту времени максимальный характерный размер исследуемых частиц увеличился до 220 Å, при этом данные хорошо аппроксимируются (χ^2 = 1,127) моделью эллиптического цилиндра с длиной (143 ± 5 Å), большой и малой осями эллипса сечения (108 ± 8) Å и (55,8 ± 2,0) Å, соответственно.

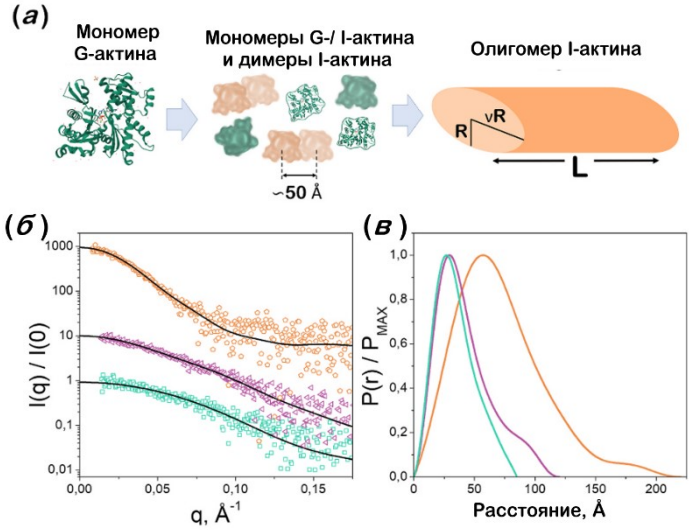


Рис. 1. Спонтанный переход G-актина в I-актин. Показаны данные, характеризующие G-актин в начальный момент времени (бирюзовый), через неделю инкубации (фиолетовый) и через 4 месяца инкубации (оранжевый, данные были получены для пиковой фракции с гель-фильтрации): *а* — схематичное изображение последовательность структурных изменений, происходящих в образце актина во время спонтанной инактивации; зеленым представлен G-актин, оранжевым — I-актин; *б* — кривые малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) для актина в разные моменты времени, черные кривые соответствуют аппроксимациям; *в* — соответствующие парные корреляционные функции [4]

Несмотря на то, что F-актин тоже является олигомером, структурно он значительно отличается от олигомера I-актина. Наилучшее приближение для данных МУРР по F-актину, основанное на моделях простой формы в программе SasView, достигается при использовании модели полугибкого эллиптического цилиндра (χ^2 = 1,076). Поскольку длина инактивированного актина достаточно велика (лежит вне диапазона измерения прибора), можно было лишь приблизительно оценить эту величину (~960 Å). Большая и малая оси эллипса сечения равны 85 Å и 52 Å, что хорошо согласуется с размерами известной структуры F-актина (PDB ID: 3J8I). Описанные выше олигомеры I-актина значительно короче, а площадь эллипса сечения примерно на 40% больше, что указывает на фундаментально различные механизмы олигомеризации I- и F-актина.

Полученные результаты позволяют предположить механизм олигомеризации актина и его общую структуру, а также его характерные отличия от хорошо известных G- и F-форм актина. Это может быть значимо в связи с тем, что актин, присутствующий в некотором количестве в клеточном ядре, формирует короткие олигомеры, отличные от F-актина [5–7]. Структура подобной формы актина практически не изучена. Если окажется, что I-актин похож на ядерный актин, это значительно упростит задачу исследователей, поскольку протоколы инактивации актина контролируемы и воспроизводимы, а выделение G-актина не представляет трудностей.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 23-15-00494.

Литература

1. *Neirynck K.* [et al.]. Actin Interacts with CCT via Discrete Binding Sites: A Binding transition-release Model for CCT-Mediated Actin Folding // J. Mol. Biol. 2006. V. 355. P. 124–138.
2. *Kuznetsova I. M.* [et al.]. Native globular actin has a thermodynamically unstable quasi-stationary structure with elements of intrinsic disorder // FEBS J. 2016. V. 283(3). P. 438–445.
3. *Kuznetsova I. M.* [et al.] Changes of structure and intramolecular mobility in the course of actin denaturation // Biophys Chem. Elsevier. 1988. V. 32(1). P. 73–78.
4. *Ryzhykau Y. L.* [et al.] Small-angle X-ray scattering structural insights into alternative pathway of actin oligomerization associated with inactivated state // Biochem Biophys Res Commun. 2024. V. 693: 149340.
5. *Belin B.J., Lee T., Mullins R. D.* DNA damage induces nuclear actin filament assembly by formin-2 and spire-1/2 that promotes efficient DNA repair // Elife. 2015. V. 4(AUGUST2015).

6. *Baarlink C.* [et al.] A transient pool of nuclear F-actin at mitotic exit controls chromatin organization // Nature Cell Biology. 2017. V. 19(12). P. 1389–1399.
7. *Baarlink C., Wang H., Grosse R*. Nuclear actin network assembly by formins regulates the SRF coactivator MAL // Science. 1979. V. 340(6134). P. 864–867.

УДК 577.352.53

Характеризация новых микробных родопсинов — потенциальных инструментов оптогенетики

***Д. В. Дорогинин*[1], *А. А. Алексеев*[1,2], *Ф. М. Цыбров*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Institute for Auditory Neuroscience and InnerEarLab, University Medical Center Göttingen (Göttingen, Germany)

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

В данной работе была проведена характеризация нового ксенородопсина *Lx*XeR, родственного ранее исследованным *Ns*XeR, *Bc*XeR, *Po*XeR и *Rm*XeR [5, 6, 7, 8], отличающегося от них одной из ключевых групп — группой высвобождения протона. Белок, функциональность которого ранее была исследована в суспензиях бактерий, экспрессирующих ген белка [9], теперь был охарактеризован методом patch-clamp в клетках нейробластомы человека SH-SY5Y. Измерения изменения pH в суспензиях бактерий, синтезирующих *Lx*XeR, при освещении показали разницу в величине эффекта изменения pH в зависимости от солевого состава и начального pH среды. Исследования методом patch-clamp подтвердили влияние кислотности среды, однако плотности фототоков в солях KCl и NaCl оказались статистически неразличимыми.

Наши текущие усилия направлены на детальное изучение пути прокачки протона в *Lx*XeR при помощи функциональной и спектроскопической характеризации мутантов этого белка, а также на получения структуры высокого разрешения. Всестороннее изучение структурно-функциональных зависимостей в *Lx*XeR помогут создать разнообразные и удобные в использовании оптогенетические инструменты на основе ксенородопсинов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-64-00018, https://rscf.ru/project/21-64-00018/.

Литература

1. *Kim C., Adhikari A., Deisseroth K.* Integration of optogenetics with complementary methodologies in systems neuroscience // Nat. Rev. Neurosci. 2017. V. 18. P. 222–235.
2. *Manoilov K. Y., Verkhusha V. V., Shcherbakova D. M.* A guide to the optogenetic regulation of endogenous molecules // Nat. Methods. 2021. V. 18. P. 1027–1037.
3. *Jeschke M., Moser T.* Considering optogenetic stimulation for cochlear implants // Hearing Research. 2015. V. 322. P. 224–234.
4. *Saeedi P.* [et al.]. Potential applications of bacteriorhodopsin mutants // Bioengineered. 2012. V. 3. P. 326–328.
5. *Shevchenko V.* [et al.]. Inward H+ pump xenorhodopsin: Mechanism and alternative optogenetic approach // Sci. Adv. 2017. V. 3(9): e1603187.
6. *Inoue S.* Spectroscopic characteristics of Rubricoccus marinus xenorhodopsin (RmXeR) and a putative model for its inward H+ transport mechanism // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20(5). P. 3172–3183.
7. *Inoue K., Ito S., Kato Y.* [et al.]. A natural light-driven inward proton pump // Nat. Commun. 2016. V. 7: 13415.
8. *Kovalev K.* [et al.]. Mechanisms of inward transmembrane proton translocation. // Nat Struct Mol Biol. 2023. V. 30. P. 970.
9. *Дорогинин Д. В., Алексеев А. А., Цыбров Ф. М.* Функциональные и спектральные свойства ксенородопсина с уникальной группой высвобождения протона // Труды 65-й Всероссийской научной конференции МФТИ в честь 115-летия Л. Д. Ландау. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: Физматкнига, 2023. С. 87–88.

УДК 576.08, 578.23

Создание стабильной клеточной линии, экспрессирующей микробный опсин в плазматической мембране клеток

Д. Ф. Багаева, А. А. Ясковец

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Оптогенетика значительно расширила возможности исследований в области нейробиологии. Также применение оптогенетики стало распространяться на невозбудимые клетки для изменения внутриклеточного метаболизма: индукции апоптоза, изменения биоэнергеники, сокращения мышц [2]. Однако в последние годы описываемый метод активно позволяет управлять клеточной физиологией на субклеточном уровне [1]. На текущий момент в ряде работ продемонстрированы перспективность и преимущества применения оптогенетических инструментов для разных органелл клетки [2].

Эффективность, с которой оптогенетические инструменты на основе микробных родопсинов могут модулировать клеточную физиологию, зависит, например, от уровня экспрессии белков, их биофизических свойств. Достижение надежных и интерпретируемых оптогенетических манипуляций на клетках требует высокой экспрессии родопсинов. Лучше всего этого можно добиться с помощью стабильной клеточной линии, экспрессирующей микробный опсин. Стабильные линии несут два явных преимущества: 1) их можно долгосрочно культивировать, что является перспективным для длительных экспериментов и получения статистических данных; 2) стабильные системы экспрессии обеспечивают более высокую надежность и однородность экспрессии, чем временные.

В рамках данной работы была разработана клеточная линия на основе HeLa — культура клеток эндотелия матки — для стабильной экспрессии опсина в плазматической мембране клеток. С помощью конфокальной лазерной сканирующей микроскопии и проточной цитометрии были охарактеризованы полученные популяции клеток. Высокие уровни экспрессии были достигнуты в большинстве случаев. Для того, чтобы количественно оценить линии с опсином, мы сравнили оптогенетические эффекты, полученные на стабильно экспрессирующих клетках и клетках с транзиентной экспрессией опсина. Из нескольких пулов полученных популяций была выбрана наиболее перспективная линия.

Ожидается, что полученная стабильная линии значительно облегчит и расширит возможности проведения физиологических экспериментов с микробными родопсинами.

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

Литература

1. *Rost B. R.* [et al.] Optogenetics at the presynapse // Nature neuroscience. 2022. V. 25(8). P. 984–998.
2. *Vlasova A. D.* [et al.] Intracellular microbial rhodopsin-based optogenetics to control metabolism and cell signaling // Chemical Society Reviews. 2024. V. 53(7). P. 3327–3349.

УДК 577.35

Исследование доменной архитектуры гистидиновых киназ в *Green Algae*

Е. В. Лаптенкова, Е. В. Зиновьев

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Гистидиновые киназы - обширное семейство белков, которые чаще всего вовлечены в функционирование сигнальных механизмов, позволяющих клеткам чувствовать и реагировать на разнообразные меж- или внутриклеточные стимулы [1]. Хотя их структура и распределение в настоящее время хорошо документированы у прокариот, информация об эукариотах все еще фрагментарна, несмотря на наличие нескольких филогенетических исследований [2]. Особый интерес представляют обнаруженные у *Green Algae* родопсиновые гистидиновые киназы, чья биологическая роль остается малоизученной [3].

Зеленые водоросли (*Green Algae*) — группа автотрофных эукариот, представители которой играют важную роль в экосистемах: они обеспечивают среду обитания и пищу для других организмов и способствуют круговороту питательных веществ, а также повышают уровень кислорода в водной среде посредством фотосинтеза. Для фотосинтетической активности *Green Algae* важна способность воспринимать

свет и реагировать на него. Принципы работы отдельных элементов, вовлеченных в эти процессы, уже объяснены [4], однако исследования продолжаются.

Основной задачей данной работы было проведение **биоинформатического анализа и исследование структурной организации гистидиновых киназ в *Green Algae* в зависимости от присутствующих в них доменов с целью понять их возможные функции**. Из базы данных Uniprot [5] были взяты аминокислотные последовательности, найденные по запросу “txid1148[Organism:exp] AND (Histidine[All Fields] AND Kinase[All Fields]”, а также те, которые были классифицированы по номенклатуре EC как гистидиновые киназы (2.7.13.-). Из полученных результатов были удалены повторы, после чего аминокислотные последовательности были обработаны инструментом InterProScan-5.66-98.0 [6] для выявления присутствующих в них доменов из коллекции Pfam. По результатам анализа белки были подвергнуты фильтрации для исключения из выборки последовательностей, которые могли попасть в нее случайно: из набора данных удалялись те экземпляры, в которых не было обнаружено ни одного характерного для гистидиновых киназ домена. В результате было получено 458 белков, которые мы с высокой вероятностью можем отнести к гистидиновым киназам.

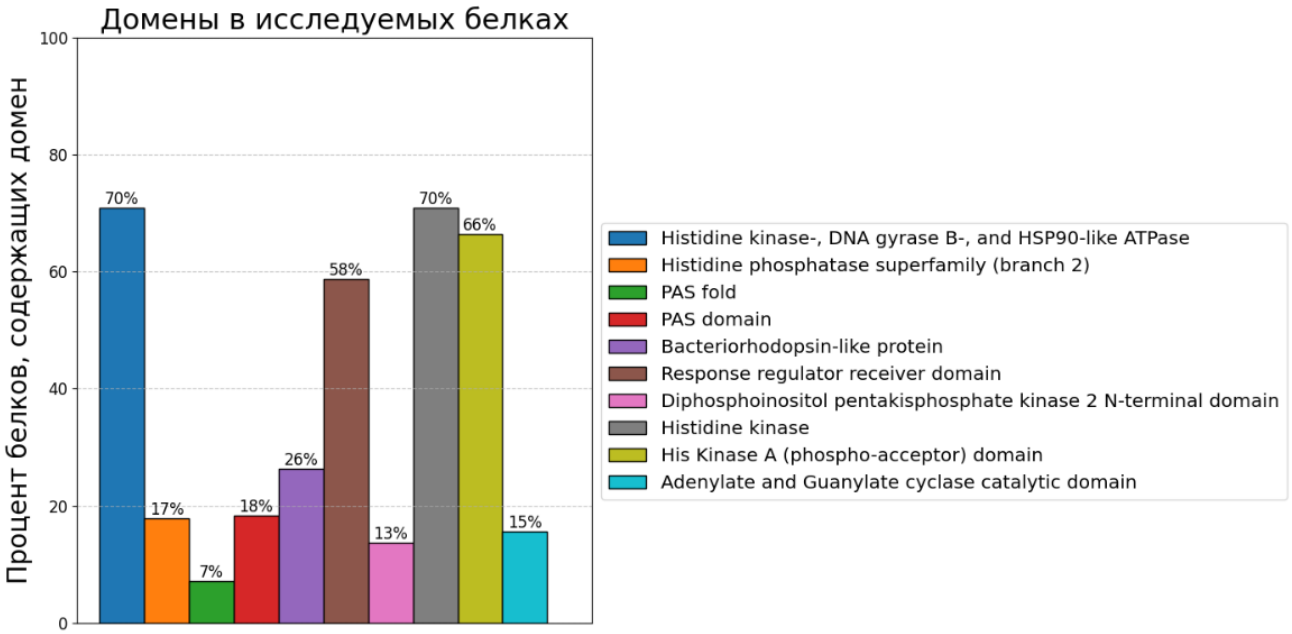


Рис. 1. Домены в исследуемых белках

Для итоговой выборки были построены графики распределения по длине аминокислотной последовательности и доменам (для всей выборки и для каждого диапазона длин в отдельности), а также вычислен процент белков в каждой группе длин, в котором присутствует каждый из часто встречающихся доменов. Было замечено, что длина аминокислотных последовательностей большинства белков не превышает 1500 аминокислотных остатков, а также то, что для наиболее длинных белков характерен один и тот же набор доменов. Мы выявили 269 белков, содержащих участки, характерные для регуляторов ответа — вероятно, все они (58%) являются гибридными гистидиновыми киназами. Также мы обнаружили, что больше четверти белков содержат домен, подобный бактериальному родопсину (рис.1), при этом, за исключением трех самых больших белков, верно, что чем длиннее аминокислотная последовательность, тем выше шанс, что в ней содержится данный домен. Большинство белков с этим участком содержит также домен регулятора ответа. Мы предполагаем, что в данной подгруппе из 97 белков участок, подобный бактериородопсину, выступает сенсором внешнего сигнала, который далее передается через консервативный гистидин на регулятор ответа.

В заключении следует отметить, что обнаружение среди значительной части гистидиновых киназ фотосинтезирующих зеленых водорослей доменов, подобных бактериородопсину, может свидетельствовать о важной роли белков с такой архитектурой для данных микроорганизмов.

Литература

1. *Alvarez A.* [et al.]. Environmental adaptation and diversification of bacterial two-component systems // Curr. Opin. Microbiol. 2023. V. 76. DOI: 10.1016/j.mib.2023.102399.
2. *Kabbara S.* [et al.]. Diversity and Evolution of Sensor Histidine Kinases in Eukaryotes // Genome Biol. Evol. 2019. V. 11(1). P. 86–108. DOI: 10.1093/gbe/evy213.
3. *Rozenberg A.* [et al.]. Microbial Rhodopsins: The Last Two Decades // Annu. Rev. Microbiol. 2021. V. 75. P. 427–447. DOI: 10.1146/annurev-micro-031721-020452.
4. *Kianianmomeni A.* [et al.]. Algal photoreceptors: in vivo functions and potential applications // Planta. 2014. V. 239. P. 1–26. DOI: 10.1007/s00425-013-1962-5.
5. Официальный сайт базы данных UniProt (the Universal Protein Knowledgebase): [Электронный ресурс]. URL: https://www.uniprot.org/ (дата обращения: 01.02.2024).
6. *Jones P.* [et al.]. InterProScan 5: genome-scale protein function // Bioinformatics. 2014. V. 30(9). P. 1236–1240. DOI: 10.1093/bioinformatics/btu031.

УДК 579.258

Экспрессионный вектор pBMS10 на основе элементов LuxR-LuxI quorum sensing системы *Aliivibrio logei*

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

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Экспрессионные векторы повсеместно используются биотехнологами и молекулярными биологами для создания бактериальных штаммов-продуцентов и дальнейшего синтеза рекомбинантных белков. Для получения штамма-продуцента в такие векторы встраивается ген, кодирующий целевой белок, после чего результирующей плазмидой трансформируется штамм-реципиент, в качестве которого часто используется бактерия *Escherichia coli*. В зависимости от регуляторных элементов экспрессионного вектора, индукция экспрессии целевого гена в клетке может происходить в ответ на различные факторы: как химические (например, различные сахара), так и физические (например, повышение или понижение температуры). Индукция понижением температуры может быть выгодна для синтеза термолабильных белков в *E. coli*. Большинство экспрессионных систем, индуцируемых понижением температуры, используют промотор холодового шока, обладают температурой индукции 15–18 С и не работают при более высоких температурах, а время экспрессии составляет 2–3 суток [1].

В основе настоящей работы лежит использование регуляторных элементов quorum sensing (QS)-системы психрофильных люминесцентных морских бактерий вида *Aliivibrio logei*. Данные бактерии регулируют люминесценцию за счет синтеза аутоиндуктора (АИ) белком LuxI и его детекции рецепторными белками, регуляторами транскрипции LuxR1 и LuxR2.

Прототипом экспрессионного вектора, созданного в ходе данной работы, является вектор pIR-DPAL [2]. За счет присутствия в нем гена *luxR2* и целевого гена под контролем LuxR2-регулируемого промотора обеспечивается возможность регуляции экспрессии целевого гена при помощи варьирования температуры культивирования и концентрации АИ в среде. Понижение температуры до 22°C индуцирует экспрессию в присутствии АИ, при повышении температуры культивации до 37°C экспрессия целевого гена прекращается даже при наличии АИ в среде.

Данная работа посвящена усовершенствованию экспрессионного вектора на основе элементов LuxR-LuxI QS системы *A. logei* за счет модификации промотора, под контролем которого встраивается целевой ген. Для температуро- и АИ-зависимой экспрессии рекомбинантных белков в векторе содержатся *luxR2* и *luxI* гены бактерии *A. logei* K18-44 под контролем собственных промоторов. Ниже гена *luxI* находится искусственный промотор P_{BMS10} с полностью палиндромным *lux*-боксом и консенсусной последовательностью в позиции –10, при этом расстояние от промотора до целевого гена было сокращено по сравнению с pIR-DPAL с 301 п. н. до 67 п. н. В обоих случаях в 6 п.н. перед старт-кодоном целевого гена расположена консенсусная последовательность Шайна–Дальгарно.

Для апробации экспрессионного вектора и сравнения его свойств со свойствами прототипа ген *gfp* клонировали в вектор pBMS10 и pIR-DPAL в качестве целевого. Клетки *E. coli* MC1061, содержащие одну из плазмид, инкубировали при различных температурах в течение 20 часов с и без добавления 1 мкМ 3-оксо-гексаноил-гомосерина лактона (3OC6-HSL), периодически отбирая пробы для оценки экспрессии GFP с помощью денатурирующего гель-электрофореза.

Анализ результатов белкового фореза при помощи программы TotalLab показал, что экспрессия *gfp* при использовании вектора на основе QS системы *A. logei* пропорциональна времени инкубации и зависит от температуры: максимальна при 22°C, практически не наблюдается при 33°C. Модификация промотора в векторе pBMS10 позволила проводить экспрессию при экзогенном внесении АИ при более высокой температуре, до 30°C включительно. Максимальное содержание GFP в лизатах клеток наблюдается при экспрессии целевого белка в pBMS10 при 22°C в течение 20 часов после добавления 1 мкМ 3OC6-HSL и достигает 50% от общего клеточного белка.

Таким образом, в ходе работы был создан экспрессионный вектор pBMS10 на основе элементов LuxR-LuxI QS системы *A. logei*, индуцируемый снижением температуры ниже 30°C, а также добавлением 3OC6-HSL, позволяющий получить высокое содержание целевого белка в клетке. Данный вектор также обладает низким базовым уровнем экспрессии в условиях отсутствия индукции и способностью к отключению уже запущенной индукции при повышении температуры до 37°C, за счет чего появляется возможность зафиксировать определенное количество целевого белка в клетке. При сохранении всех ключевых качеств прототипа pIR-DPAL обновленный вектор pBMS10 позволяет проводить индукцию при температурах до 30°C. Разработанная экспрессионная система будет востребована для наработки белков из психрофильных организмов, в том числе белков LuxR1 и LuxR2, являющихся близкими гомологами LuxR из *Aliivirio fischeri*, ни один из которых до настоящего времени не кристаллизован, и структура их не известна.

Работа поддержана грантом РНФ22-14-00124.

Литература

1. *Vera A.* [et al.]. The conformational quality of insoluble recombinant proteins is enhanced at low growth temperatures // Biotechnol. Bioeng. 2007. V. 96(6). P. 1101–1106.
2. *Bazhenov S. V.* [et al.]. New temperature-switchable acyl homoserine lactone-regulated expression vector // Appl. Microbiol. Biotechnol. 2023. V. 107(3). P. 807–818.

УДК 577.322

Новый флавин-связывающий флуоресцентный белок с большим стоксовым сдвигом

Е. А. Маркеева, А. С. Николаев, И. Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

LOV-домены (сокращение от “Light, Oxygen, or Voltage” sensing domains) это флуоресцентные белки, реагирующие на синий и УФ свет благодаря связыванию с хромофором — флавинмононуклеотидом (ФМН) или другими флавинами [1]. Благодаря относительно небольшим размерам (~12–16 кДа, в два раза меньше GFP-подобных белков) и отсутствию необходимости наличия кислорода и доставки хромофора в клетки LOV-домены нашли применение во флуоресцентной микроскопии и оптогенетике [2]. Для фотоцикла природных LOV-доменов характерно формирование ковалентного аддукта между хромофором и цистеином белка. Для использования LOV доменов в качестве флуоресцентной метки была внесена мутация, меняющая консервативный цистеин на аланин [3]. Белки с такой мутацией называют флавин-связывающими флуоресцентными белками (FbFPs). Одним из наиболее термостабильных является CagFbFP, полученный из гистидин киназы термофильной бактерии *Chloroflexus aggregans* [4].

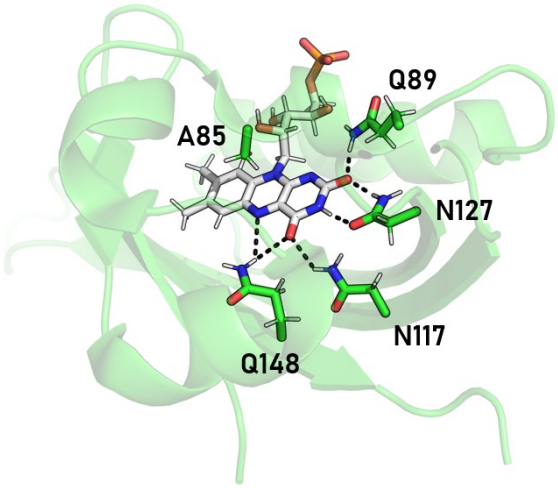


Рис. 1. Структура CagFbFP (PDB ID 6RHF [4]), показаны близлежащие от хромофора аминокислоты

Для CagFbFP типичен спектр поглощения с максимумом в окрестности 450 нм и спектр эмиссии с максимумом в окрестности 500 нм. Для использования в многоцветной флуоресцентной микроскопии необходимо создание FbFPs с различными спектрами поглощения и эмиссии. Один из подходов к изменению спектров флуоресцентных белков с флавинами, не требующий химической модификации хромофора, это изменение аминокислотного окружения хромофора. На рис. 1 показаны полярные аминокислоты, окружающие хромофор в CagFbFP. Используя метод насыщенного случайного мутагенеза для двух позиций (A85, Q148) и последующий отбор мутантов со спектральными сдвигами, мы создали палитру из 22 вариантов, максимумы эмиссии которых покрывают интервал от 486 до 512 нм [5].

В данной работе проводился мутагенез аминокислотных позиций N127, N117, Q89. В результате был обнаружен мутант, получивший название B6, с большим стоксовым сдвигом (~ 120 нм) (рис. 2).

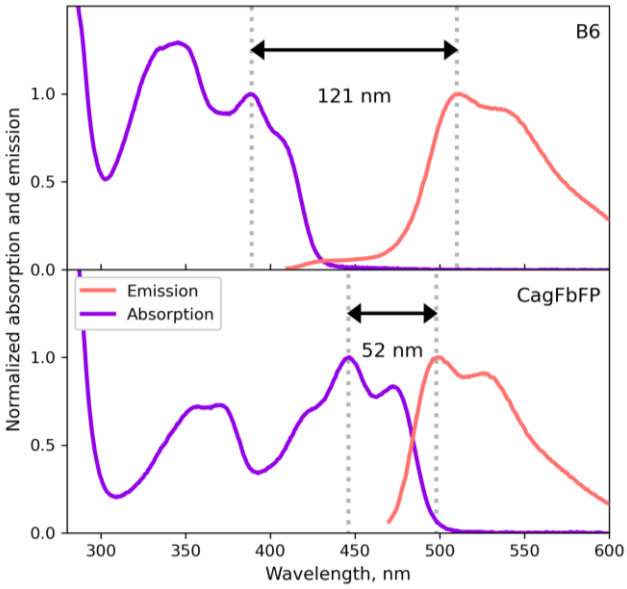


Рис. 2. Спектры поглощения и эмиссии оригинального белка CagFbFP и мутанта B6

Были изучены фотофизические свойства B6: спектры поглощения, возбуждения и эмиссии флуоресценции, термостабильность, коэффициент экстинкции. Также были получены кристаллографические структуры B6, проливающие свет на причину возникновения у мутанта B6 большого стоксового сдвига.

Литература

1. *Christie J. M.* [et al.]. LOV (light, oxygen, or voltage) domains of the blue-light photoreceptor phototropin (nph1): Binding sites for the chromophore flavin mononucleotide // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 1999. V. 96 (15). P. 8779–8783.
2. *Shcherbakova D. M.* [et al.]. Natural photoreceptors as a source of fluorescent proteins, biosensors, and optogenetic tools // Annu. Rev. Biochem. 2015. V. 84. P. 519–550.

3. *Drepper T.* [et al.]. Reporter proteins for in vivo fluorescence without oxygen // Nat. Biotechnol. 2007. V. 25 (4). P. 443–445.
4. *Nazarenko V. V.* [et al.]. A thermostable flavin-based fluorescent protein from Chloroflexus aggregans: a framework for ultra-high resolution structural studies // Photochem. Photobiol. Sci. 2019. V. 18 (7). P. 1793–1805.
5. *Nikolaev A.* [et al.]. Fine spectral tuning of a flavin-binding fluorescent protein for multicolor imaging // J. Biol. Chem. 2023. V. 299(3). P. 102977.

УДК 577.322

Реинжиниринг люмазин-связывающего флуоресцентного белка.

Е. А. Кузнецова, А. С. Николаев, И. Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университе

В морской среде обитает большое количество фотобактерий, которые способны излучать сине-зеленый свет с пиковой длиной волны около 490 нм за счет биолюминесценции люциферазы. Однако некоторые виды биолюминесцентных бактерий, такие как *Photobacterium phosphoreum*, *Photobacterium leiognathi* и *Vibrio fischeri Y1*, способны излучать свет и на других длинах волн. Эти бактерии производят дополнительные флуоресцентные белки, которые оптически возбуждаются в результате безызлучательного перехода, используя бактериальную люциферазу в качестве источника энергии. Этот процесс, известный как ферстеровский перенос энергии (FRET), приводит к сдвигу спектра излучения донора. Например, в штамме P. *phosphoreum* был найден люмазин-связывающий белок (LumP), который смещает спектр излучения на 13 нм в синюю область, при этом увеличивая квантовый выход [1].

На основе предыдущих исследований известно, что LumP представляет собой белок массой 22 кДа, состоящий из двух гомологичных доменов, но только N-концевой домен связывает флюорофор (6,7-диметил-8-рибитиллумазин), делая это нековалентным образом [2]. Люмазиновый белок выделяется своим длительным временем жизни флуоресценции (13,6 нс), одним из наибольших среди всех генетически кодируемых флуоресцентных белков [3]. С другой стороны, белок LumP является стабильным только до 42 °C, что сужает условия, при которых он эффективно выполняет свою функцию.

Для решения задачи по стабилизации белка мы решили использовать нейросеть SolubleMPNN [4-5]. Основываясь на тренировочной выборке, SolubleMPNN предсказывает последовательность аминокислот, которая с большой вероятностью фолдируется в заданную структуру. Различными научными группами наблюдалось, что полученные при помощи данного метода белки получаются растворимые и экспрессируются с большим выходом, а также обладают большой термостабильностью. На настоящий момент нами сгенерирован ряд последовательностей оптимизированных LumP, проверена их стабильность *in silico*. Проведена гетерологическая экспрессия и определены функциональные свойства методами спектрофотометрии.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 21-64-00018).

Литература

1. *Gast R., Lee J.* Isolation of the in vivo emitter in bacterial bioluminescence //Proceedings of the National Academy of Sciences. 1978. V. 33(2). P. 833-837.
2. *Scheuring J.* [et al.] (Trifluoromethyl)lumazine derivatives as 19F NMR probes for lumazine protein //Biochemistry. 1994. V. 33(24). P. 7634-7640.
3. Bajar B. T. et al. A guide to fluorescent protein FRET pairs //Sensors. 2016. T. 16. V. (9). P. 1488.
4. *Dauparas J.* [et al.] Robust deep learning–based protein sequence design using ProteinMPNN //Science. 2022. V. 378(6615). P. 49-56.
5. *Goverde C. A.* [et al.] Computational design of soluble analogues of integral membrane protein structures //bioRxiv. [2023]. bioRxiv: 2023.05.09.540044.

УДК 577.322.23, 577.322.54

Исследование процесса образования инактивированного актина при различных условиях с использованием метода МУРР-ГФ

И. О. Безручко, О. И. Поварова[2], Д. Д. Куклина[1,2], Е. А. Дронова[1], Ю. А. Загрядская[1], И. С. Охрименко[1], Ю. А. Антифеева[2], К. К. Туроверов[2], И. М. Кузнецова[2], Ю. Л. Рижиков[1,3]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт цитологии РАН
[3]Объединенный институт ядерных исследований

Помимо хорошо изученных мономерной глобулярной и фибриллярной форм актин может существовать и в так называемой инактивированной форме (G-актин, F-актин и I-актин соответственно) [1]. В глобулярной форме актин находится в термодинамически неустойчивом состоянии и при длительном хранении самопроизвольно переходит в инактивированное состояние. Этот процесс существенно ускоряется при нагревании и воздействии денатурирующих агентов; при этом G-актин сначала превращается в кинетический интермедиат, представляющий собой белок в существенно развернутом состоянии (англ. e*ssential unfolded state*, U*) [1]. Эти существенно развернутые мономеры белка склонны к ассоциации с образованием сплюснутых вытянутых частиц, поперечное сечение которых на 40% больше, чем у F-актина [2].

В данной работе с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния, сопряженного с гель- фильтрацией (МУРР-ГФ), изучались форма и характерные размеры I-актина, полученного различными способами: при нагревании, воздействии денатурирующих (мочевина) и хелатирующих (ЭДТА) агентов. Измерения проводились на установке BL19U2 синхротрона SSRF (Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Шанхай, Китай). Для определения формы и характерных размеров I-актина использовались MW и параметры простейших моделей: эллиптического цилиндра и прямоугольного параллелепипеда, а также параметры Rg, Rc и Rt [3], которые определяются из кривых малоуглового рассеяния в предположении $L \gg d \gg h$, где L, d, h — характерные значения длины, ширины и высоты олигомеров I-актина.

В результате было показано, что образующиеся олигомеры имеют форму сплюснутой вытянутой частицы (средние значения параметров параллелепипеда c: b : a = 2,8 : 1,6 : 1); при этом существенной разницы между воздействием денатурирующего и хелатирующего агентов не было обнаружено: среднее значение MW в 8–10 раз превосходило значение молекулярной массы G-актина, объемы модельных тел отклонялись от усредненного значения не более чем на 13% (исключение составил образец, на который воздействовали ЭДТА с более низкой (0,4 мМ) концентрацией — MW превосходила значение массы G-актина только в 6 раз). Образец, который был подвергнут нагреванию, можно аппроксимировать эллиптическим цилиндром высотой 478 Å и длинами полуосей 83 Å и 33 Å. Это предполагает, что его масса существенно больше, чем была определена ранее [1], что требует уточнения предложенных ранее моделей и механизмов олигомеризации актина.

Методом нативного белкового гель-электрофореза было обнаружено, что в каждом случае фракция содержит смесь олигомеров, отстоящих друг от друга по массе, равной массе 2 мономеров G-актина, что позволяет предположить механизм протекания олигомеризации через образование димеров, из которых “собирается” олигомер, что подтверждает выводы работы [2].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 23-15-00494.

Литература

1. *Kuznetsova I. M.* [et al.]. Native globular actin has a thermodynamically unstable quasi-stationary structure with elements of intrinsic disorder // FEBS J. 2016. V. 283(3). P. 438–445.
2. *Ryzhykau Y. L.* [et al.]. Small-angle X-ray scattering structural insights into alternative pathway of actin oligomerization associated with inactivated state // Biochem. Biophys. Res. Commun. 2024. V. 693: 149340.
3. *Свергун Д. И., Фейгин Л. А.* Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. — М.: Наука, 1986.

УДК 577.322.63

Структурное исследование мутантных форм эндолизина LysSi3, активного в отношении грамотрицательных полирезистентных бактерий

***И. О. Матюта*[1,2], *Н. Н. Случанко*[1], *Д. В. Васина*[3], *К. М. Бойко*[1]**

[1]Институт биохимии им. А. Н. Баха, ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. акад. Н. Ф. Гамалеи Минздрава РФ

В настоящее время проблема множественной лекарственной устойчивости (МЛУ) у бактерий чрезвычайно актуальна во всем мире. Возникновение устойчивости значительно снижает эффективность противомикробной терапии пациентов, повышает смертность, а также увеличивает расходы на их лечение. Бактериолитические ферменты, действующие на клеточную стенку бактерий, вызывают растущий интерес в качестве антибактериальных средств, особенно против патогенов с МЛУ. Одним из перспективных биологических объектов в этом направлении являются эндолизины — ферменты бактериофагов, которые способны разрушать пептидогликан (ПГ) грамположительных и грамотрицательных патогенов [1]. Эндолизины вырабатываются на финальной стадии развития бактерифагов для специфического расщепления различных типов связей в пептидогликане, вызывая при этом деградацию клеточной стенки и лизис бактерий с высвобождением дочерних фаговых частиц. Это свойство эндолизинов привело к растущему числу исследований, направленных на применение этого класса ферментов в качестве антибактериальных средств. Однако, литическая активность большинства эндолизинов значительно снижена в отношении клеток, находящихся в стационарной фазе роста, вероятно, из-за структурной или химической модификации клеточной оболочки [2]. Это может сказываться на эффективности препаратов на основе эндолизинов при их практическом применении. Более того, не до конца ясен механизм проникновения эндолизинов через мембрану грамотрицательных бактерий к месту локализации непосредственного субстрата — ПГ. Комплексная структурно-функциональная характеристика ферментов этого класса, направленная на повышение эффективности эндолизинов, является, таким образом, актуальной научной задачей.

Целью данной работы является получение и структурное исследование эндолизина LysSi3, представляющего собой лизоцим-подобную мурамидазу, дополненное его функциональной характеристикой, для выяснения механизмов повышения эффективности этого фермента.

В рамках данной работы был получен ряд мутантных форм исследуемого белка по ключевым остаткам, предположительно определяющим активность LysSi3, с помощью рентгеноструктурного анализа получены пространственные структуры этих белков и проведен их сравнительный анализ с установленной ранее структурой LysSi3 дикого типа.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации - грант № 075-15-2021-1354.

Литература

1. *Broendum S. S., Buckle A. M., McGowan S.* Catalytic diversity and cell wall binding repeats in the phage-encoded endolysins // Mol. Microbiol. 2018. V. 110. P. 879–896. DOI: 10.1111/mmi.14134.
2. *Oliveira H., São-José C., Azeredo J.* Phage-Derived Peptidoglycan Degrading Enzymes: Challenges and Future Prospects for In Vivo Therapy // Viruses. 2018. V. 10(6): 292. DOI: 10.3390/v10060292.

УДК 577.112.4

Сайт-специфическое спиновое мечение GPCR в нативной мембране

***И. С. Левашов*[1], *И. А. Капранов*[1], *Ф. С. Орехов*[2], *Н. П. Исаев*[3], *В. И. Борщевский*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Совместный университет МГУ-ППИ в Шэньчжэне (Шэньчжэнь, КНР)
[3]Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) — метод, позволяющий изучать структуру и конформационную динамику как водорастворимых, так и мембранных белков. Интересным

объектом, который можно исследовать при помощи ЭПР, являются рецепторы, связанные с G-белком (GPCRs), служащие мишенями для множества фармакологических препаратов [1].

Одним из этапов подготовки образца к ЭПР-эксперименту является конъюгация белка с химическим соединением, содержащим парамагнитный центр. В большинстве случаев используется сайт-специфическое мечение, которое происходит за счет образования дисульфидной связи между тиольной группой цистеинов исследуемой молекулы и реакционноактивной группой метки. Для подобных экспериментов обычно применяются белки с измененной первичной последовательностью: в область интереса вводится цистеин, в то время как остальные цистеины, доступные для мечения, заменяются на другие аминокислотные остатки.

По данным научной литературы сайт-специфическое мечение мембранных белков проводится после их очистки — в мицеллах [2]. При таком подходе метка способна реагировать со свободными цистеинами, находящимися в трансмембранных доменах белка, и влиять на форму ЭПР-спектра, искажая результаты эксперимента. Одним из способов решения этой проблемы является мечение белка до солюбилизации, так как цистеины трансмембранных доменов белка экранируются плазматической мембраной и не взаимодействуют с меткой. Успешное применение данного метода было продемонстрировано для флуоресцентных красителей и меток для ядерного магнитного резонанса [3]. В представленной работе показано, что подобная стратегия применима также для спиновой метки MTSL (methanethiosulfonate spin label), часто используемой для проведения ЭПР-экспериментов.

В процессе работы были получены две мутантные формы исследуемого рецептора: контрольная, содержащая свободные цистеины лишь в мембранной области, и опытная, содержащая дополнительно два цистеина в доменах белка, находящихся в цитоплазме. Мечение рецептора с использованием MTSL проводилось до солюбилизации — в нативной мембране, или после — в мицеллах. Для определения эффективности мечения белков и проверки наличия несвязавшегося MTSL в растворе использовался стационарный ЭПР спектрометр JEOL JES-FA200. Было показано, что при мечении рецепторов в мицеллах сигнал ЭПР для опытного образца сопоставим с сигналом для контрольного (рис. 1). В то же время при мечении в мембранах сигнал для контрольного образца практически отсутствует, что говорит о том, что взаимодействие метки с цистеинами трансмембранных доменов не происходит (рис. 1). Также по форме спектра можно сделать вывод о том, что свободная метка отсутствует во всех образцах.

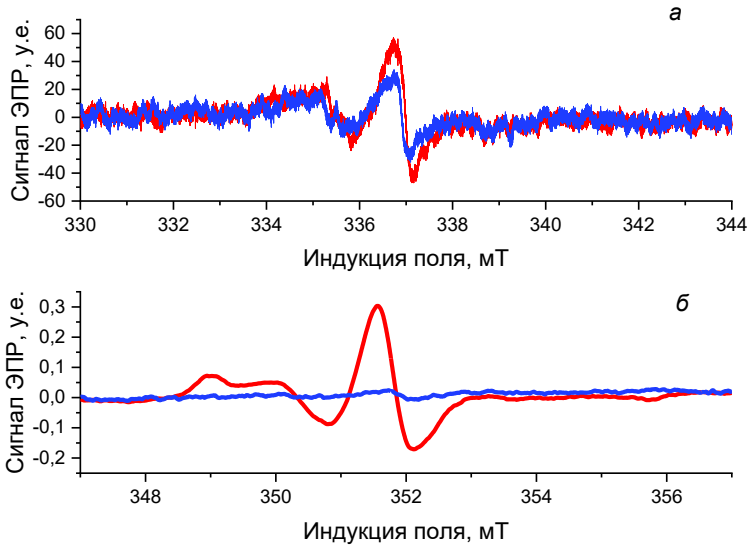


Рис. 1. Сигнал ЭПР образцов GPCR, меченных MTSL в мицеллах (*а*) и мембранах (*б*). Кривые, соответствующие контрольному образцу (рецептор, имеющий свободные цистеины лишь в трансмембранных доменах), окрашены синим, а опытному (рецептор, имеющий свободные цистеины в мембранном пространстве и дополнительно два цистеина — в цитоплазматических доменах) — красным

Таким образом, в данной работе было показано, что обработка исследуемого рецептора спиновой меткой MTSL в нативной мембране помогает избежать ее связывания с цистеинами трансмембранных доменов. Применение вышеописанного метода удобно в тех случаях, когда удаление трансмембранных цистеинов нежелательно или невозможно.

Хочется выразить благодарность Е. В. Третьякову (Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН) и Н. Н. Ефимову (Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН) за предоставленную возможность работать на ЭПР-спектрометрах.

Работа выполнена при поддержке проекта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение # 075-03-2024-117, проект FSMG-2024-0012).

Литература

1. *Sriram K., Insel P. A*. How Many G Protein-Coupled Receptors are Drug Targets? Molecular Pharmacology. 2018. V. 93. P. 251–258. DOI: 10.1124/mol.117.111062.
2. *Elgeti M.., Hubbell W. L.* DEER Analysis of GPCR Conformational Heterogeneity//Biomolecules. 2021. V. 11(6). Article number 778. DOI: 10.3390/biom11060778.
3. *Sušac L.* [et al.]. In-Membrane Chemical Modification (IMCM) for Site-Specific Chromophore Labeling of GPCRs // Angewandte Chem International Edition. 2015. V.54(50). P. 15246-15249. DOI: 10.1002/anie.201508506.

УДК 577.112.7

Получение и структурная характеризация октамерного белкового комплекса на основе модифицированного апоферритина

***М. С. Гетте*[1], *В. В. Сударев*[1], *С. В. Баженов*[1], *О. М. Тилинова*[1,2], *Е. В. Зиновьев*[1,2], *И. В. Манухов*[1], *А. И. Куклин*[1,2], *Ю. Л. Рижиков*[1,2], *А. В. Власов*[1,2]**

[1]Московский Физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

Ферритин — универсальный полисубъединичный белковый комплекс, отвечающий за хранение железа практически во всех организмах. Отличительной особенностью ферритина является самосборка — спонтанное образование сферической полой белковой глобулы, состоящей из 24-х субъединиц [1]. Процесс самосборки делает ферритин привлекательным объектом для использования в биотехнологии, в частности для создания рекомбинантных вакцин [2]. Различные платформы на основе ферритина имеют общие проблемы, ограничивающие их развитие, а именно контроль процессов самосборки самого ферритина и химерных рекомбинантных белковых комплексов на его основе. В данной работе мы изучали процессы самосборки белковых комплексов на основе ферритина при различных условиях экспрессии.

Были разработаны конструкции на основе гена ферритина из *H. pylori*, представляющие собой апоферритин с модификацией N-концевого участка. Первая конструкция «FerHis» содержит гистидиновую метку. Вторая конструкция «FerSUMO» содержит гистидиновую метку с присоединенной белковой меткой с SMT3 (SUMO).

Был проведен биосинтез белков FerSUMO с использованием культуральных сред CM24 и CM8, белка FerHis в среде CM24 [3]. Полученные образцы FerHis (CM24), FerSUMO (CM24) и FerSUMO (CM8) были исследованы методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Профили интенсивности рассеяния на образцах FerHis (CM24) и FerSUMO (CM24) соответствуют объектам сферической формы, в то время как профиль рассеяния FerSUMO (CM8) значительно отличается от них. Аппроксимация экспериментальных данных с помощью программы CRYSOL и CORAL (PDB ID: 3BVE) показывает наличие 24-мерных комплексов 24xFerHis ($\chi2$ = 1,343) и 24xFerSUMO ($\chi2$ = 1,02) для образцов FerHis (CM24) и FerSUMO (CM24), а также октамерного олигомера 8xFerSUMO ($\chi2$ = 1,09) для образца FerSUMO (CM8).

Также было проведено моделирование октамерного олигомера FerSUMO с помощью программы AlphaFold. Полученная модель (8xFerSUMO) с максимальным значением TM-score была использована для аппроксимации экспериментальных данных с помощью программы CRYSOL образца FerSUMO (CM8) ($\chi2$ = 1,066). Результаты показаны на рис. 1.

Таким образом, в данной работе был получен и структурно охарактеризован октамерный белковый комплекс ферритин-SUMO. Данное олигомерное состояние не приводит к дальнейшей сборке 24-мерной белковой глобулы, то есть является тупиковым. Тупиковые олигомерные состояния ферритина дополняют известную схему процесса его самосборки. Полученные результаты могут открыть новые направления для различных подходов в биотехнологии, использующих платформы на основе ферритина.

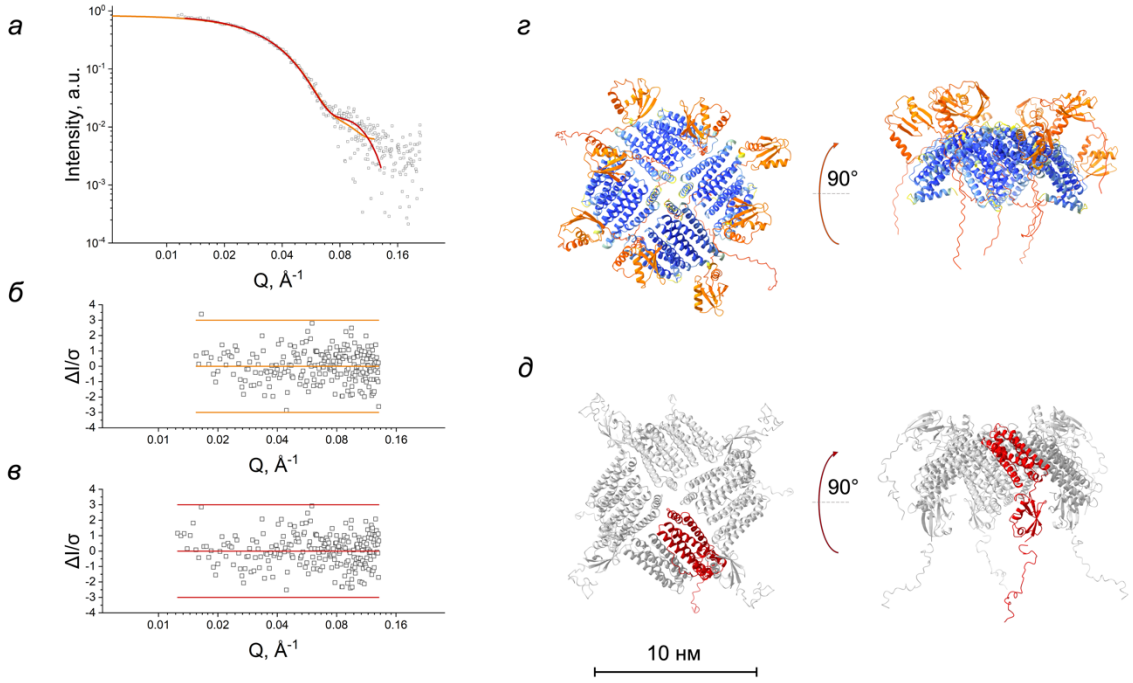


Рис. 1. Сравнение моделей 8xFerSUMO, полученных с помощью программ AlphaFold и CORAL [3]. (а) Экспериментально полученная кривая рассеяния I(Q) для образца FerSUMO (CM8) и кривые рассеяния, полученные в программе CRYSOL для моделей из программ AlphaFold (оранжевый) и CORAL (красный). (б) Относительные погрешности данных МУРР, соответствующие модели 8xFerSUMO из программы AlphaFold. (в) Относительные погрешности данных МУРР, соответствующие модели 8xFerSUMO из программы CORAL. (г) Модель 8xFerSUMO, созданная с помощью AlphaFold (показана в двух разных проекциях). Модель окрашена в соответствии с оценкой pLDDT (красный соответствует низкой степени достоверности, а синий — высокой). (д) Модель 8xFerSUMO с высоким разрешением, построенная при помощи программы CORAL (одна субъединица 1xFerSUMO выделена красным) в двух разных проекциях

Литература

1. *Zhang Y., Orner B. P.* Self-Assembly in the Ferritin Nano-Cage Protein Superfamily // International Journal of Molecular Sciences. 2011. V. 12(8) P. 5406–5421.
2. *Sudarev V. V.* [et al.] Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // International Journal of Biological Macromolecules. 2023. V. 224. P. 319–343.
3. *Sudarev V. V.* [et al.] Ferritin-based fusion protein shows octameric deadlock state of self-assembly // Biochemical and Biophysical Research Communications. 2024. V. 690: 149276.

УДК 577.322.2

Применение генетически-кодируемых флуоресцентных зондов для детекции функционирования родопсинов в *E. coli*

И. А. Ильина, С. М. Бухалович, А. Д. Власова

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Множество направлений в биофизике, молекулярной и клеточной биологии возникли и развиваются благодаря разным методам, базирующимся на флуоресценции. По этой причине широко распространено использование генетически-кодируемых флуоресцентных зондов — это молекулы, способные флуоресцировать при воздействии света определенной длины волны. Флуоресценция зондов, в свою очередь, зависит от связывания с различными ионами, малыми молекулами, белками, биологическими мембранами и другими компонентами клетки [1]. Генетически-кодируемые флуоресцентные зонды могут активно реагировать на изменения, такие как колебания pH и концентрации ионов кальция, окислительно-восстановительные реакции, модуляция активности ферментов, изменения мембранного потенциала и др. [2].

Благодаря флуоресцентным белковым зондам можно исследовать функции фотоактивных родопсинов [3, 4]. В результате данной работы мы создали штаммы бактерий *E. coli* со встроенными в них плазмидами с генами зондов, которые могут быть использованы для детекции работы родопсинов, а также для исследования биоэнергетики *E. coli*.

В работе использовались флуоресцентные генетически-кодируемые зонды SypHer3s и FGCaMP7. Спектр флуоресценции SypHer3s имеет два максимума возбуждения при 410 и 495 нм и одну полосу эмиссии при 525 нм. Сигнал зонда измеряется как соотношение интенсивностей флуоресценции при возбуждении при 495 нм и 410 нм (F495/F410), которое зависит от pH и используется для калибровки зонда. Диапазон pH-чувствительности этого зонда 5,5–10,5 pH, при этом соотношение (F495/F410) увеличивается более чем в 36 раз [5]. FGCaMP является генетически-кодируемым индикатором Ca^{2+}. FGCaMP содержит кальмодулин и связывающийся с ним пептид M13, который претерпевает конформационные изменения в присутствии ионов кальция, приводящие к изменению интенсивности флуоресценции. В не связанных с Ca^{2+} и в связанных с Ca^{2+} конформациях FGCaMP имеет максимумы поглощения/флуоресценции при 402/516 и 493/516 нм соответственно [6].

В процессе работы были получены генетические конструкции с генами флуоресцентных зондов и созданы штаммы *E. coli* с генами SypHer3s и FGCaMP7 с помощью методов молекулярного клонирования. Были проведены трансформация и коэкспрессия генов зонда SypHer3s и мембранных белков (родопсинов): двух прямых протонных помп: Arch3 из *Halorubrum sodomense*, *Spa*R из *Sphingomonas paucimobilis;* и обратной протонной помпы: *Ns*XeR из археи *Nanosalina sp*.

Исследование флуоресценции зондов проводилось с помощью конфокальной флуоресцентной микроскопии. Была получена калибровочная кривая для SypHer3s с помощью возбуждения зонда лазерами 488 нм и 405 нм. Далее измеряли интенсивность флуоресценции зонда во времени при освещении клеток, экспрессирующих гены родопсинов. Также были определены значения pH в суспензии клеток при освещении, при этом наблюдалось изменение pH суспензии бактерий (закисление среды, если встроена прямая помпа, и защелачивание, если обратная).

В процессе исследований была отработана методика использования генетически-кодируемых флуоресцентных зондов для детекции функционирования родопсинов в *E. coli*. Были определены светозависимые изменения pH во внутриклеточном пространстве *E. coli*, экспрессирующих гены NsXeR, Arch3 и SpaR, и в их суспензии.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ «Второй этап развития оптогенетики: новые подходы для исследований и медицины», 21-64-00018.

Литература

1. *Schepartz A., Gonzalez Jr R. L.* Molecular imaging: sine labore nihil // Curr. Opin. Chem. Biol. 2011. V. 15(6). P. 749–751.
2. *Ai H.* Fluorescent-protein-based probes: general principles and practices // Anal. Bioanal. Chem. 2015. V. 407. P. 9–15.
3. *Gushchin I., Gordeliy V.* Microbial rhodopsins // Membrane Protein Complexes: Structure and Function. 2018. P. 19–56.
4. *Govorunova E. G.* [et al.]. Microbial Rhodopsins: Diversity, Mechanisms, and Optogenetic Applications // Annu. Rev. Biochem. 2017. V. 86(1). P. 845–872.
5. *Ermakova Y. G.* [et al.]. SypHer3s: a genetically encoded fluorescent ratiometric probe with enhanced brightness and an improved dynamic range // Chem. Commun. 2018. V. 54(23). P. 2898–2901.
6. *Barykina N. V.* [et al.]. Green fluorescent genetically encoded calcium indicator based on calmodulin/M13-peptide from fungi // PloS One. 2017. V. 12(8): e0183757.

УДК авторами не указан

Экспериментальный и теоретический анализ конкурентного связывания лигандов с ДНК

***К. К. Хорунжева*[1], *Ю. Д. Нечипуренко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт молекулярной биологии им. В. А. Энгельгардта РАН

Важной задачей молекулярной биофизики является поиск лигандов, которые могут избирательно связываться с нуклеиновыми кислотами и влиять на экспрессию генов. В данной работе проводится анализ изотерм адсорбции конкурентного связывания нового лиганда X и его модифицированной формы с ДНК в присутствии EtBr, оценивается константа связывания лиганда X с ДНК и размер связывающего

места лиганда на ДНК. Используемый в работе лиганд X синтезирован и предоставлен Борисом Папоновым, это 5-(4-диметиламино)-стирил-7-метилтиазоло[1,5-a]пиримидиний перхлорат.

Известно, что новый лиганд и его модифицированная форма не образуют соединений с EtBr. Также известно, что соединения X и его модифицированной формы с ДНК не флуоресцируют, а соединение EtBr с ДНК обладает флуоресцентными свойствами. В ходе исследования была проведена серия спектрофлуориметрических экспериментов по измерению интенсивности флуоресценции растворов, содержащих ДНК и EtBr, в зависимости от концентрации добавленного нового лиганда. На основе этих данных были построены изотермы адсорбции конкурентного связывания нового лиганда и EtBr с ДНК. В ходе анализа изотерм адсорбции конкурентного связывания было принято решение использовать для описания адсорбции теоретическую модель, учитывающую размеры связывающих мест лигандов с ДНК и возможность наличия у нового лиганда двух форм с различными константами связывания при взаимодействии с ДНК [1]. На основе этой теоретической модели было проведено компьютерное моделирование уменьшения флуоресценции EtBr вследствие вытеснения его за счет конкурентного связывания второго лиганда X, оценен размер связывающего места лиганда X на ДНК и константа связывания нового лиганда с ДНК, которая оказалась почти на порядок больше, чем константа связывания EtBr с ДНК в тех же условиях, что подтверждает возможность вытеснения EtBr с ДНК новым лигандом. Авторы выражают благодарность Дмитрию Калюжному за предоставленное оборудование и обсуждение постановки задачи, а также Борису Папонову за синтез лиганда.

Литература

1. *Нечипуренко Ю. Д.* Анализ связывания биологически активных соединений с нуклеиновыми кислотами. — М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2015.

УДК 577.22

Исследование эффективности амфифильных полимеров SMA и DIBMA для солюбилизации гистидинкиназы NarQ и белка E оболочки коронавируса

И. И. Натаров, Е. А. Кузнецова, О. Ю. Семенов, А. А. Ремеева, И. Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ключевой стадией подготовки образцов для исследований мембранных белков является процесс солюбилизации белка из клеточной мембраны. Одним из набирающих популярность в данной области методов является использование амфифильных сополимеров, которые способны экстрагировать из мембраны белки и связанные с ними липиды в форме нативных нанодисков [1]. В отличие от наиболее часто используемой солюбилизации мицеллами детергента, часто приводящей к потере структурной целостности и функциональности белка, применение данных полимеров позволяет сохранить естественное липидное окружение белковой молекулы [2]. Благодаря эту важному различию, амфифильные полимеры являются перспективным инструментом для выделения и очистки мембранных белков в стабильных и биологически активных конформациях.

В настоящее время активно идут разработки новых амфифильных полимеров и подбор оптимальных условий проведения солюбилизации [3]. Несмотря на экспоненциально возрастающее количество исследований в данной области [4], экспериментальная проверка применимости различных амфифильных полимеров для экстракции новых типов мембранных белков остается актуальной научной задачей. Целью данной работы является исследование эффективности различных сополимеров стирола и малеиновой кислоты (SMA), а также диизобутилена и малеиновой кислоты (DIBMA) для солюбилизации гистидинкиназы NarQ *Escherichia coli* [5] и белка E оболочки коронавируса SARS-CoV-2 [6].

Для экспериментов по солюбилизации белка NarQ были использованы 8 коммерчески доступных полимеров SMA и DIBMA, различных по молярной массе и относительному содержанию мономеров. Успешно экстрагировать белок из клеточной мембраны удалось только одним из исследуемых полимеров. В ходе работы эффективность данного амфифильного полимера также была экспериментально доказана для солюбилизации двух гибридных мембранных белков на основе белка E коронавируса. Выбранный по результатам данных экспериментов полимер был использован для получения образцов изучаемых белков высокой степени очистки для дальнейших структурно-функциональных исследований.

Литература

1. *Dörr J. M.* [et al.]. Detergent-free isolation, characterization, and functional reconstitution of a tetrameric K+ channel: the power of native nanodiscs // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2014. V. 111(52). P. 18607–18612.
2. *Orwick-Rydmark M.* [et al.]. Detergent-free incorporation of a seven-transmembrane receptor protein into nanosized bilayer Lipodisq particles for functional and biophysical studies // Nano letters. 2012. V. 12(9). P. 4687–4692.
3. *Workman C. E.* [et al.]. Alternatives to Styrene-and Diisobutylene-Based Copolymers for Membrane Protein Solubilization via Nanodisc Formation // Angewandte Chemie. 2023. V. 135(43): e202306572.
4. SMALP Network [Электронный портал]. URL: https://www.smalp.net (дата обращения 01.03.2024).
5. *Gushchin I.* [et al.]. Mechanism of transmembrane signaling by sensor histidine kinases // Science. 2017. V. 356(6342): eaah6345.
6. *Mehregan A.* [et al.]. Probing effects of the SARS-CoV-2 E protein on membrane curvature and intracellular calcium // Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes. 2022. V. 1864(10). P. 183994.

УДК 577.22

Влияние одиночных мутаций на свойства фотодекарбоксилазы жирных кислот из *Chlorella variabilis*

О. Ю. Семенов, И. И. Натаров, А. С. Кузьмин, А. А. Ремеева, И. Ю. Гущин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время химическая промышленность и использование природных ресурсов оказывают значительное негативное воздействие на окружающую среду, создавая угрозу для ее состояния. Возможный способ решения этой проблемы заключается в развитии биотехнологических методов, позволяющих заменить ископаемые ресурсы на возобновляемые. Фотобиокатализ является перспективным направлением в этой области, так как позволяет осуществлять экологически безопасные и высокоселективные превращения. На сегодняшний день известно про четыре семейства фотоферментов [1], среди которых фотодекарбоксилазы жирных кислот (ФЖК) представляют наибольший интерес для применения в промышленности.

Открытая в 2017 году ФЖК из *Chlorella variabilis* (CvFAP) продемонстрировала активность в отношение широкого спектра субстратов без необходимости в потреблении дополнительных кофакторов. Однако такие недостатки как низкая термо- и фотостабильность ограничивают ее применение и изменение функциональной активности [2]. Хотя некоторые успехи были достигнуты в повышении стабильности фермента и перепрофилировании его под иные субстраты [3], существует потенциал для дальнейших усовершенствований.

В данной работе были получены 5 конструкций с одиночными мутациями в белке ФЖК из *Chlorella variabilis* (CvFAP) и проанализированы их уровни экспрессии, термостабильность и оптические свойства по сравнению с диким типом.

Литература

1. *Björn L.O.* Photoenzymes and Related Topics: An Update // Photochemistry and Photobiology. 2018. V. 94(3). P. 459–465.
2. *Wu Y.* [et al.] Stabilisation of the Fatty Acid Decarboxylase from Chlorella variabilis by Caprylic Acid // ChemBioChem. 2021. V. 22(14). P. 2420–2423.
3. *Emmanuel M.A.* [et al.] Photobiocatalytic Strategies for Organic Synthesis // Chemical Reviews. 2023. V. 123(9). P. 5459–5520.

УДК 542.06

Оптогенетические и химические методы воздействия на повышение pH лизосом, ассоциированное с патологиями

Н. С. Добрынин, С. Ф. Назарова, В. А. Алехин, В. В. Павлов, С. М. Бухалович, А. Д. Власова, Н. С. Ильинский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Разработка методов лечения возрастных заболеваний, таких как протеинопатии и рак, остается весьма актуальной, несмотря на значительные достижения в исследованиях их патогенеза. Причиной этих заболеваний часто становится нарушение кислотно-основного баланса внутриклеточных компартментов. Уровень pH в клетках и органеллах, таких как лизосомы, в здоровом состоянии поддерживается в физиологическом диапазоне, однако с возрастом или под влиянием различных патологий механизмы гомеостаза ослабевают [1].

Для эффективной работы лизосом необходим низкий pH 4,5–5,2 [1], соответствующий оптимальным условиям для работы содержащихся в них гидролаз. Высокая кислотность достигается благодаря работе вакуолярной АТФ-азы (v-ATPase) - белка, расположенного в мембране лизосом. Этот белок, используя энергию АТФ, переносит протоны из цитоплазмы в лизосому [2]. Ингибирование v-ATPase приводит к изменению кислотности лизосом, что влечет за собой серьезные последствия для здоровья человека [3]. Важно иметь удобный и точный инструмент для контроля активности vATPase. Существующие методы мониторинга активности данного белка трудоемки и не позволяют проводить функциональные тесты *in situ* [4].

Еще одним примером важности поддержания кислотно-основного баланса является уязвимость фагоцитирующих клеток перед факторами, снижающим активность лизосомных ферментов [5]. Фагоцитирующие клетки обеспечивают постоянную очистку органов от дисфункциональных компонентов, поэтому важно иметь инструменты, способные детектировать и снижать лизосомный pH для активации литических ферментов.

В данной работе нами были использованы методы родопсиновой оптогенетики для контроля активности v-ATPase. Для моделирования патологических состояний использовались клетки, в которых функция v-ATPase была ингибирована при помощи бафиломицина A1 [6] или метформина [7]. Для моделирования здорового состояния с активной аутофагией клетки содержались в культуральной среде с низким содержанием глюкозы и дополнительно трансфицировались плазмидой, содержащей транскрипционный фактор EB (TFEB). При помощи протонной помпы, перемещающей под действием света протоны из лизосом в цитозоль, в клетках HEK293 Phoenix AMPHO достигалось повышение значения pH лизосом. Для возвращения кислотности к прежнему значению требовалось различное количество времени для клеток в патологическом состоянии и клеток в здоровом состоянии. Таким образом, мы обнаружили корреляцию времени релаксации и уровня активности vATPase. Данный оптогенетический метод позволяет контролировать активность v-ATPase *in situ* и открывает возможность дальнейшего мониторинга функциональности лизосом в приложении *in vivo*.

Для исследования фагоцитирующих клеток нами были использованы клетки пигментного эпителия сетчатки человека линии ARPE-19. В процессе данной научно-исследовательской работы мы моделировали патологическое состояние накопления липофусциновых гранул при помощи добавления к клеткам ARPE-19 фрагментов фоторецепторов, бафиломицина A1 и трет-бутилгидропероксида. Далее проверяли способность различных химических агентов, таких как форсколин, зафирлукаст, 5′-N-этил-карбоксамидоаденозин (NECA), форбол-12-миристат-13-ацетат (PMA), нормализовывать pH и восстанавливать аутофагическую активность. Результат оценивался при помощи сравнения липофусциноподобной флуоресценции в смоделированном патологическом состоянии и после химического воздействия.

Таким образом, отработан метод *in situ* мониторинга активности v-ATPase, применены методы химического закисления лизосом для нормализации аутофагии. В дальнейшем планируется развитие оптогенетических методов для закисления лизосом и ранней диагностики патологий, связанных с дисфункцией активности v-ATPase.

Оптогенетические эксперименты выполнены за счет гранта Российского научного фонда 21-64-00018. Тесты активности v-ATPase выполнены за счет проекта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение # 075-03-2024-117, проект FSMG-2024-0012).

Литература

1. *Bonam S. R., Wang F., Muller S.* Lysosomes as a therapeutic target // Nat. Rev. Drug Discov. 2019. V. 18. P. 923–948.
2. *Carmona-Gutierrez D.* [et al.]. The crucial impact of lysosomes in aging and longevity // Ageing Res. Rev. 2016. V. 32. P. 2–12.
3. *Freeman S. A., Grinstein S., Orlowski J.* Determinants, maintenance, and function of organellar pH // Physiol. Rev. 2023. V. 103. P. 515–606.
4. *Forgac M.* Vacuolar ATPases: rotary proton pumps in physiology and pathophysiology // Nat. Rev. Mol. Cell Biol. 2007. V. 8. P. 917–929.
5. *Elner V.* [et al.]. *M.* Retinal pigment epithelial acid lipase activity and lipoprotein receptors: effects of dietary omega-3 fatty acids // Trans. Am. Ophthalmol. Soc. 2002. V. 100: 301.
6. *Yoshimori T.* [et al.]. Bafilomycin A1, a specific inhibitor of vacuolar-type H (+)-ATPase, inhibits acidification and protein degradation in lysosomes of cultured cells // J. Biol. Chem. 1991. V. 266. P. 17707–17712.
7. *Ma T.* [et al.]. Low-dose metformin targets the lysosomal AMPK pathway through PEN2 // Nature. 2022. V. 603. P. 159–165.

УДК 577.322.9

Разработка протоколов лиофилизации рекомбинантных бактериальных апоферритинов

***О. М. Тилинова*[1], *М. С. Гетте*[1], *В. В. Сударев*[1], *С. В. Баженов*[1], *Н. А. Бондарев*[1], *Ю. Л. Рижиков*[1,2], *И. В. Манухов*[1], *А. И. Куклин*[1,2], *А. В. Власов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

Ферритин — это глобулярный белковый комплекс, состоящий из 24 субъединиц, образующих полость диаметром 8 нм для хранения железа. Предельная емкость этой полости составляет около 4500 атомов железа. Апоферритином называется белок с незаполненной железом полостью [1]. Ввиду структурных особенностей, способности к самосборке, биоразлагаемости и биосовместимости использование ферритина для транспорта лекарств представляет особый интерес для биомедицины [2]. Для увеличения срока хранения и простоты транспортировки в биофармацевтических препаратах широко используется лиофилизация или сублимационная сушка. Лиофилизация — это многоступенчатый процесс, который может повлиять на стабильность белка и его свойства. В данной работе под термином «лиофилизация» мы понимаем вакуумную сушку без предварительной заморозки. Для сохранения структурных и функциональных особенностей белка при лиофилизации используются вспомогательные вещества, например, д-маннитол [3].

В работе мы изучали стабильность ферритина при разных способах лиофилизации. В качестве объекта исследования был взят рекомбинантный апоферритин из организма Helicobacter pylori с концентрацией 19 мг/мл. Лиофилизация белка производилась в растворе д-маннитола (предельная растворимость 150 мг/мл) в буфере 20 мМ Tris pH 8.1 в различных массовых соотношениях апоферритина к д-маннитолу, а именно 1:0, 1:1, 1:2, 1:3, 1:5, 1:10, 1:20, 1:30. Лиофилизация апоферритина производилась как в вакуумной камере с использованием масляного вакуумного насоса, так и в роторном эксикаторе с использованием безмасляного вакуумного насоса. Исследование лиофилизованных образцов, восстановленных в mQ, проводилось методом динамического светорассеяния (ДРС) на приборе DynaProNanoStar. В качестве контрольных образцов использовались нелиофилизованные образцы.

Данные ДРС показали, что предыстория пробоподготовки (лиофилизации) апоферритина имеет большое значение. При лиофилизации в роторном эксикаторе структурно-функциональные особенности белка не нарушались, поэтому д-маннитол в любой из рассмотренных концентраций не повлиял на результаты ДРС. Лиофилизация с использованием вакуумной камеры нарушала сборку апоферритина, и в этом случае добавление д-маннитола (особенно в массовых соотношениях 1:2 и 1:20) позволяло при восстановлении mQ получить белок с параметрами радиуса гирации (Rg), соответствующими глобулярной структуре апоферритина.

В результате, были разработаны два различных протокола для лиофилизации бактериального апоферритина. Каждый из способов лиофилизации имеет свои преимущества и недостатки и может быть использован в зависимости от конкретной задачи.

Литература

1. *Sudarev V. V.* [et al.]. Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications // Int. J. Biol. Macromol. 2023. V. 224. P. 319–343. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2022.10.126.
2. *Zhang B*. [et al.]. Ferritin nanocage: A promising and designable multi-module platform for constructing dynamic nano-assembly-based drug nanocarrier // Adv. Drug Deliv. Rev. 2021. V. 176. P. 113892. DOI: 10.1016/j.addr.2021.113892.
3. *Remmele L.* [et al.]. Development of stable lyophilized protein drug products // Curr. Pharm. Biotechnol. 2012. V. 13(3). P. 471–496. DOI: 10.2174/138920112799361990.

УДК 57.016.2

Биоинформатический поиск структурных белков галофильной археи *Haloquadratum walsbyi*

***О. В. Семкин*[1], *Е. В. Лаптенкова*[1], *Ю. Л. Рижиков*[1,2], *Е. А. Дронова*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

Haloquadratum walsbyi (Hw) — галофильная архея, которая обладает плоской квадратной формой. В водных экосистемах, насыщенных $NaCl$ и обогащенных $MgCl_2$, где наблюдается серьезный стресс от высыхания из-за крайне низкой активности воды, *Hw* является преобладающим организмом [1]. Эта архея вызвала значительный интерес в научном сообществе благодаря своей квадратной форме и способности обитать в средах, чрезвычайно богатых солями. Томографические изображения показывают, что *Hw* имеет два типа внутриклеточных структур: газовые везикулы и гранулы полигидроксибутирата. В геноме данной археи был обнаружен один из самых больших архейных белков, размер которого составляет 9159 аминокислот (ак) — галомуцин, секретируемый белок, способствующий образованию гидрогелевой капсулы вокруг клетки [2].

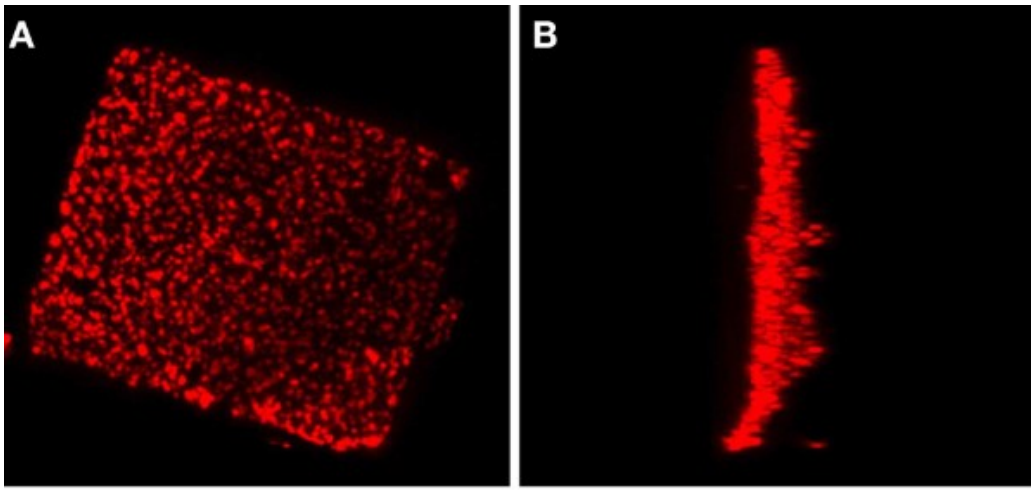


Рис. 1. Микрофотография клетки Hw с гранулами полигидроксибутирата [2]

Клетки *Hw* представляют собой плоские (0.1–0.2 мкм в толщину) квадраты со стороной 2–10 мкм [3], способные образовывать хрупкие пленки размером до 40х40 мкм [4]. Такое строение клетки обеспечивает наибольшее среди всех микроорганизмов отношение площади поверхности археи к ее объему [5]. Благодаря большой площади поверхности *Hw* обладает высокоэффективной системой транспортных мембранных белков, необходимых для гетеротрофного питания, а также реализует эффективное фототрофное питание: светочувствительные протонные помпы, бактериородопсины, располагаются по всей поверхности мембраны, а благодаря небольшой толщине солнечный свет способен пронизывать архею насквозь [5]. Однако до сих пор не установлен механизм, обеспечивающий нестандартную морфологию тонкой квадратной галоархеи. Также в геноме не удалось однозначно идентифицировать гены, которые могли бы кодировать структурные белки [2]. В связи с этим, ответ на вопрос, связанный с причинностью строения *Hw,* является актуальной нерешенной задачей. Для исследования *Hw* был проведен биоинформатический анализ.

Поскольку толщина археи довольно мала и при этом постоянна, изначально была выдвинута гипотеза о том, что существуют белки, удерживающие две противоположные мембраны. В данной работе были рассмотрены наиболее простые возможные конфигурации таких белков:

1) мономеры (М), представляющие собой две трансмембранные части, заякоренные в противоположных мембранах и соединенные цитоплазматическим доменом;

2) димеры (Д), которые, имея трансмембранную часть, протягиваются через цитоплазму и димеризуются по концевому цитоплазматическому домену.

Исследования были проведены с помощью биоинформатических методов: в случае М, благодаря базе данных Uniprot были отобраны белки, для которых оценка снизу размера цитоплазматической части (т. е. количество аминокислот) в предположении, что она является α-спиралью, составляла $600 \text{ ак} < L_{\text{м}}$, где $L_{\text{м}} = \frac{h_{\text{м}}}{L_{\text{в}}} * n_{\text{в}} = \frac{0.1}{0.00054} * 3.6 \approx 667$ ак, $h_{\text{м}}$ — толщина клетки, $n_{\text{в}}$ — среднее количество ак в одном витке α-спирали, $L_{\text{в}}$– длина одного витка [6]. Затем с помощью алгоритма, написанного на Python, были отобраны потенциально подходящие белки, у которых существует водорастворимый (ВР) домен, длина которого больше 600 ак. Из полученных 28 белков были идентифицированы белки, у которых найденная ВР часть цитоплазматическая, для этого были использованы две версии программы: TMHMM и DeepTMHMM, которые иногда показывали противоречащие друг другу результаты. Как итог, было получено 7 потенциально подходящих М. К примеру, один из них, UniProt ID Q18IW6_HALWD, имел интересную структуру, его цитоплазматическая часть состояла из β-листов, плотно друг с другом связанных, что вело к малой длине белка, около 20 нм, также было сделано предположение, что данный белок способен образовывать димерные контакты по концевому цитоплазматическому домену, поскольку это способен делать его бактериальный гомолог: UniProt ID Q18IW6_HALWD. Димер найденного белка потенциально мог бы удерживать углы квадратной структуры *Hw.* подобно димеру Opa1, который удерживает форму крист в митохондриях.

В случае Д, с помощью Uniprot были отобраны мембранные белки, у которых пептидный конец ВР и его длина превышает 300 ак. Затем все 199 белков были исследованы на наличие концевой цитоплазматической части с помощью программ TMHMM и DeepTMHMM, результатом которых стал набор из 69 потенциально подходящих белков.

Далее белки в геноме *Hw* были проанализированы на предмет гомологии:

1) с 13 наиболее распространенными структурными белками различных организмов: FtsZ, CetZ1, Tubulin, MreB, sph1, HCO_2015, phragmoplastin DRP1E, crenactin, archaeal actin, arcadin, myotubularin, amphiphysin, dynamin-1-like;

2) с 3 белками, которые могут влиять на форму археи: Bar, CheB, RdfA [7].

При помощи программы BLAST был обнаружен белок UniProt ID G0LI74_HALWC с неопределенной функцией, гомологичный белку HCO_2015 более чем на 80%. UniProt ID D4GU28_HALVD — актиноподобный белок (АБ) галофильной археи *Haloferax volcanii*, названный волактином, одна из функций которого — участие в процессе перехода организма из палочковидного состояния в дискообразное, путем образования филаментов, выступающих в роли внутриклеточных распорок; в *Halobium salinarum* присутствует свой АБ — салактин, филаменты которого, напротив, стремятся от полюсов к центру клетки [7]. Было сделано предположение, что UniProt ID G0LI74_HALWC в Hw — АБ, то есть влияет на структуру археи, что было проверено с помощью программы SWISS-MODEL [8, 9]. Она выявила совместимость белка UniProt ID D4GU28_HALVD с кристаллическими структурами MreB из *Thermotoga maritima*. Ген, кодирующий белок UniProt ID D4GU28_HALVD, был обнаружен в геноме всех штаммов Hw, что говорит об универсальной функции и важности обнаруженного белка.

Результатом биоинформатического исследования стало выявление структурного белка, гомолога актина, названный квадрактином, который, образуя филаменты, может играть роль в поддержании плоской формы клеток Hw. Также были определены белки, димеры которых гипотетически могли бы поддерживать квадратную форму археи.

Литература*:*

1. *Bolhuis H*. [et al.]. The genome of the square archaeon Haloquadratum walsbyi: Life at the limits of water activity // BMC Genomics. 2006. V. 7: 169. DOI: 10.1186/1471-2164-7-169.
2. *Zenke R.* [et al.]. Fluorescence microscopy visualization of halomucin, a secreted 927 kDa protein surrounding Haloquadratum walsbyi cells // Front Microbiol. 2015. V. 6: 249. DOI: 10.3389/fmicb.2015.00249.
3. *Saponetti M. S.* [et al.]. Morphological and structural aspects of the extremely halophilic Archaeon Haloquadratum walsbyi // PLoS One. 2011. V. 6(4): e18653. DOI: 10.1371/journal.pone.0018653.
4. *LoBasso S.* Lipids of the ultra-thin square halophilic archaeon Haloquadratum walsbyi // Archaea. 2008. V. 2(3). P. 177–183. DOI: 10.1155/2008/870191/

5. *Tully B. J.* [et al.]. De novo sequences of haloquadratum walsbyi from Lake Tyrrell, Australia, reveal a variable genomic landscape // Archaea. 2015. V. 2015: 875784. DOI: 10.1155/2015/875784.
6. The UniProt Consortium. UniProt: the Universal Protein Knowledgebase in 2023 // Nucleic Acids Research. 2023. V. 51(D1). P. D523–D531. DOI: 10.1093/nar/gkac1052.
7. *Schiller H.* [et al.]. Identification of structural and regulatory cell-shape determinants in Haloferax volcanii // Nat Commun. 2024. V. 15(1): 1414. DOI: 10.1038/s41467-024-45196-0.
8. *Waterhouse A.* [et al.]. SWISS-MODEL: Homology modelling of protein structures and complexes // Nucleic Acids Res. 2018. V. 46(W1). P. W296–W303. DOI: 10.1093/nar/gky427.
9. *Bertoni M.* [et al.]. Modeling protein quaternary structure of homo- and hetero-oligomers beyond binary interactions by homology // Sci Rep. 2017. V. 7(1): 10480. DOI: 10.1038/s41598-017-09654-8.

УДК 577.323

Идентификация галофильных люминесцентных бактерий на основе секвенирования генов «домашнего хозяйства»

***Р. В. Скрипниченко*[1,2], *С. В. Баженов*[1], *И. В. Манухов*[1], *В. О. Матвеева*[1], *А. А. Уткина*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Южный федеральный университет

Люминесцентные биосенсоры находят широкое применение в качестве аналитического инструмента для решения фундаментальных и прикладных задач, например в целях биомониторинга [1]. Поиск и изучение новых штаммов люминесцентных бактерий открывает дополнительные возможности для создания биосенсоров с новыми свойствами. Штаммы бактерий BM23-3 и BM23-8 были выделены из воды Белого моря (Республика Карелия) в июне 2023 года; штаммы RK-2 и RK-27 выделены из воды Аральского моря (Республика Казахстан) в сентябре 2023 года; штаммы были отобраны по наличию способности к люминесценции. Предварительная идентификация на основании гена 16S рРНК установила возможную принадлежность штамма BM23-3 к видам *Vibrio splendidus* и V. *echinoideorum*, штамма BM23-8 — к виду *Aliivibrio sifiae*, штамма RK-2 — к виду *Vibrio tarriae*, штамма RK-27 — к виду *Vibrio vulnificus*. Цель данной работы — уточнить видовую принадлежность штаммов путем секвенирования генов «домашнего хозяйства». Для этого были выбраны следующие гены: ген ДНК-гиразы *gyrB* для штаммов BM23-3, BM23-8 и RK-27, ген уридилаткиназы *pyrH* для штамма RK-2.

Штаммы культивировались поверхностно на питательной среде SWT (состав среды, г/л: триптон, 5; дрожжевой экстракт, 2,5; морская соль, 25; глицерин, 3; агар-агар, 15) при 30°C в течение суток. Из накопленной биомассы выделяли тотальную ДНК в соответствии с методикой [2]. Качество выделения оценивалось методом электрофореза в агарозном геле. Полученную ДНК использовали в качестве матрицы для постановки ПЦР со следующими праймерами. Для гена *gyrB*: прямой 22fVf (5’-GAAGTTATCATGACGGTACTTC-3’) и обратный 1240rVf (5’-AGCGTACGAATGTGAGAACC-3’; предполагаемая длина ПЦР-продукта 1256-1258 п.н.); для гена *pyrH*: прямой pyrH-04-FW (5’-ATGASNACBAAYCCWAAACC-3’) и обратный PBPRB2966R (5’-GAATCGGCATTTTATGGTCACG-3’; предполагаемая длина ампликона 646 п.н.) [3]. Для проведения ПЦР использовали набор реактивов ScreenMix («Евроген») в соответствии с протоколом производителя. После постановки аналитической ПЦР и подтверждения результатов с помощью электрофореза в агарозном геле проводили ПЦР в препаративных количествах для последующей электроэлюции и переосаждения продуктов ПЦР. Проэлюированные и переосажденные продукты препаративной ПЦР отправлялись на секвенирование в компанию «Евроген». Полученные сиквенсы обрабатывались с помощью программы SnapGene [4] для удаления плохо разрешенных нуклеотидов и затем анализировались с помощью программы BLASTN [5]. Для сиквенса гена каждого штамма выбирали 10 наиболее гомологичных последовательностей типовых штаммов из базы данных NCBI, строили филогенетическое дерево с помощью программы MEGA для каждого штамма и на его основании определяли видовую принадлежность [6]. Для оценки достоверности определения рассчитывали вероятность образования кластеров, содержащих типовые штаммы, методом bootstrap (500 повторов).

В результате секвенирования были получены и обработаны последовательности фрагментов гена *gyrB* для штаммов BM23-3 (длина анализируемого фрагмента 651 п.н.), BM23-8 (622 п.н.) и RK-27 (620 п.н.), а также гена *pyrH* для штамма RK-2 (599 п.н.). Анализ фрагментов выявил следующие совпадения: штамма BM23-3 на 98,73% с типовыми штаммами вида V. *splendidus* (bootstrap-рассчитанная вероятность образования кластера штамма BM23-3 с типовыми штаммами вида составила 76%); штамма BM23-8 на

96,74% с типовыми штаммами вида *Photobacterium piscicola* (вероятность 97%); штамма RK-27 на 97,24% с типовыми штаммами вида V. *vulnificus* (вероятность 100%); штамма RK-2 на 98,99% с типовыми штаммами вида *Vibrio cholerae* (вероятность 98%). Поскольку принятый в литературе порог идентичности последовательностей для идентификации с точностью до вида составляет 98,7% [7], можно сделать вывод, что штамм RK-2 принадлежит к виду V. *cholerae*, а штамм BM23-3 принадлежит к виду V. *splendidus*. Видовая принадлежность штаммов BM23-8 и RK-27 остается невыясненной, предполагается их дальнейшее исследование. Таким образом, в результате выполнения данной работы впервые показано существование люминесцирующей микрофлоры в акватории Аральского моря, в составе которой имеются представители видов V. *splendidus* и V. *cholerae*.

Исследование выполнено в лаборатории «Здоровье почв» Южного федерального университета при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-15-2022-1122.

Литература

1. *Ismailov A. D., Aleskerova L. E.* Photobiosensors containing luminescent bacteria // Biochemistry (Moscow). 2015. V. 80. P. 733–744.
2. *Сидорук К. В.* [и др.]. Метод экстракции ДНК из широкого спектра объектов с помощью обработки солями аммония // Биотехнология. 2020. Т. 36. № 6. С. 98–106.
3. *Хрульнова С. А.* Психрофильные морские светящиеся бактерии *Aliivibrio logei*: структура lux-оперона и регуляция типа “Quorum sensing”: дис. … канд. биол. наук. М., 2011.
4. SnapGene. Software for everyday molecular biology. URL: https://www.snapgene.com/ (дата обращения: 22.02.2024).
5. BLASTN programs search nucleotide databases using a nucleotide query. URL: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/geo/query/blast.html (дата обращения: 22.02.2024).
6. Molecular Evolutionary Genetics Analysis. URL: https://www.megasoftware.net/ (дата обращения: 22.02.2024).
7. *Rosselló-Móra R., Amann R.* Past and future species definitions for Bacteria and Archaea // Systematic and applied microbiology. 2015. V. 38. № 4. P. 209–216.

УДК 571.27

Оптимизация морфометрии дыхательных путей для оценки распределения патогенов

***С. С. Шаляпин*[1,2], *С. А. Портнов*[1,2], *А. О. Богородский*[3], *В. И. Борщевский*[3], *М. А. Шевченко*[1]**

[1]Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН
[2]Национáльный исследовательский ядерный университет (Московский инженерно-физический институт)
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Условно-патогенные грибы рода *Aspergillus* являются одними из наиболее распространенных микроорганизмов в атмосфере городов. Попадая с током воздуха в респираторный тракт человека часть спор гриба оседает на стенках бронхов, остальные достигают альвеолярного пространства [1].

Респираторная система человека представляет собой систему воздуховходов различных порядков. Трахеобронхиальные стенки представляют собой сложные структуры с толстым псевдомногослойным эпителием, представленным различными типами клеток, включая клетки, продуцирующие слизь, и реснитчатые клетки, обеспечивающие мукоцилиарный клиренс. В альвеолах отсутствуют реснитчатые клетки, и попадающие в альвеолярное пространство патогены не могут быть выведены из организма мукоцилиарным клиренсом. Более того, каждая генерация дыхательных путей представляет собой нишу для различных популяций иммунных клеток, уникальных для определенных генераций дыхательных путей. Так, альвеолярные макрофаги находятся в альвеолярных компартментах, в то время как трахея и главный бронх выстланы интраэпителиальными дендритными клетками [2].

Оценка доли спор, ассоциированных с различными генерациями дыхательных путей необходима для исследования механизмов элиминации спор из организма. Для проведения такой оценки необходимо получить количественные характеристики генераций дыхательного пути, а именно, провести морфометрический анализ.

В настоящем исследовании был разработан подход для морфометрии генераций дыхательного пути, построенных на основе трехмерных изображений, полученных при помощи конфокальной лазерной сканирующей микроскопии. Изображения легких модельного организма (мыши) получали при помощи конфокального микроскопа Zeiss LSM780 (Carl Zeiss) с 10 × (NA = 0.3) объективом. Оптически

очищенные образцы подвергали конфокальной микроскопии по аналогии с описанным ранее [3]. Изображения были получены в виде набора Z - проекций и преобразованы в трехмерное объемное изображение при помощи программного обеспечения Imaris 9.8 (Oxford Instruments).

В данной работе был использован регион дыхательного дерева, полученный при помощи функции “Crop3D”. При помощи функций “Surface” и “Mask” для этого региона были построены поверхность и маска дыхательного пути. При построении поверхности на основе маски было проведено деление поверхности на элементы. Используя различные пороговые значения можно регулировать размер элементов поверхности. Для дальнейшей работы был выбран размер элементов 20 мкм.

Объединение элементов в группы, позволило получить различные генерации дыхательных путей. На данном этапе работы для группировки элементов использовалось ручное выделение. Для каждой генерации при помощи программного обеспечения Imaris 9.8 были рассчитаны объемы выделенных генераций (указаны справа на рис. 1).

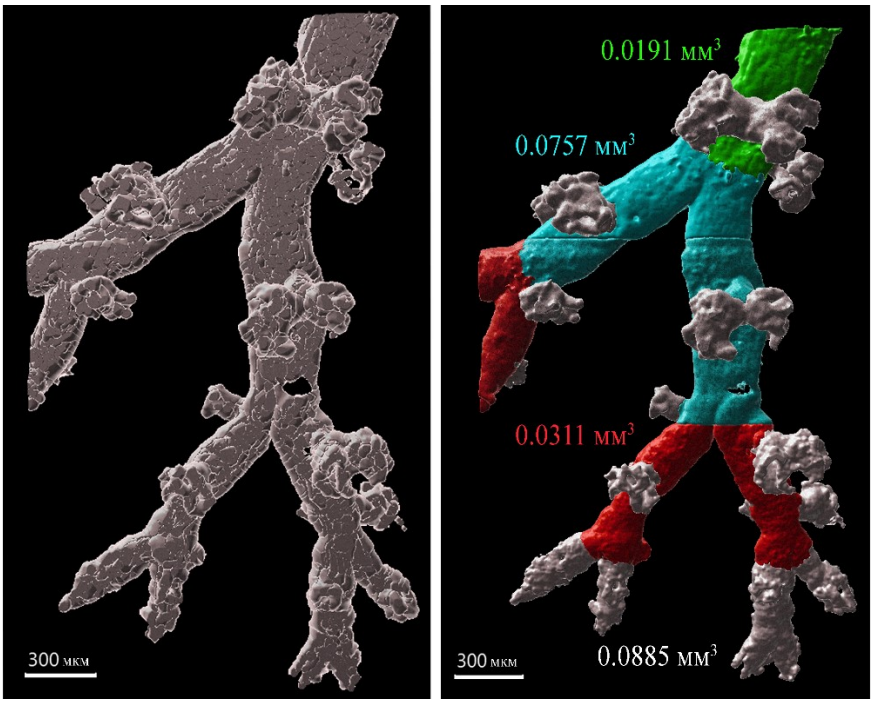


Рис. 1. Регион респираторного дерева мыши, представленный в виде поверхности, разбитой на элементы объемом 20 мкм (слева) и после объединения элементов в генерации дыхательных путей (справа)

Таким образом, в данной работе был предложен метод разбиения региона дыхательного дерева на генерации, а также оценка его морфометрии. Такой подход позволит в дальнейшем идентифицировать количество патогенов относительно единицы объема поверхности дыхательного пути. Кроме того, подобный подход возможно будет использовать для оценки биодоступности ингаляционных форм лекарственных препаратов.

Литература

1. *Van de Veerdonk F. L.* [et al.] *Aspergillus fumigatus* morphology and dynamic host interactions // Nat Rev Microbiol. 2017. V.15(11):661-674. DOI: 10.1038/nrmicro.2017.90.
2. *Maslov I. V., Bogorodskiy A. O., Pavelchenko M. V.* [et al.] Confocal laser scanning microscopy-based quantitative analysis of *Aspergillus fumigatus* conidia distribution in whole-mount optically cleared mouse lung // J. Vis. Exp. 2021. V. 18(175): e62436. DOI: 10.3791/62436.
3. *Scott G. D.* [et al.] Tissue optical clearing, three-dimensional imaging, and computer morphometry in whole mouse lungs and human airways // Am J Respir Cell Mol Biol. 2014. V. 51(1): 43–55. DOI: 10.1165/rcmb.2013-0284OC.

УДК 577.112.8

Сравнительный анализ структур высокого разрешения мембранных белков

***С. А. Журавлев*[1], *С. Д. Иващенко*[1,2], *Д. Д. Куклина*[1], *А. С. Казанцев*[1], *Ю. Л. Рижиков*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Лаборатория микробиологии, РОСБИОТЕХ
[3]Объединенный институт ядерных исследований

Мембранные белки (МБ) играют важную роль в жизни клетки и ее коммуникации с окружением: они служат транспортерами, рецепторами, ферментами и т.д. Эти белки составляют 20–30% всех белков, закодированных в геноме известных организмов. Мембранные белки служат мишенями для порядка 60% современных лекарственных препаратов. Получение структур высокого разрешения мембранных белков играет значительную роль в изучении их функций и взаимодействия с лигандами (в т.ч. с лекарствами). На сегодняшний день, количество структур мембранных белков, представленных в базе данных PDB относительно невелико, порядка 1-2% от общего числа белковых структур. Однако имеющееся количество (12321 структур, из которых 1683 уникальных) является достаточным для проведения сравнительного анализа МБ и их классификации.

Существует несколько баз данных, которые используются для индексации мембранных белков: MemProtMD [1], mpstruc [2], OPM [3], PDBTM [4], SCOP [5]. В силу различия критериев, по которым МБ вносятся в базы данных, эти базы не являются полностью перекрывающимися множествами (см. Рис. 1). В ходе данной работы был создан пакет программ для работы с API баз данных мембранных белков mpstruc, OPM, PDBTM, MemProtMD и их анализа. Базы данных были объединены в один массив, который может постоянно обновляться и редактироваться, а также оценено отношение между базами данных (количество пересечений между списками структур МБ).

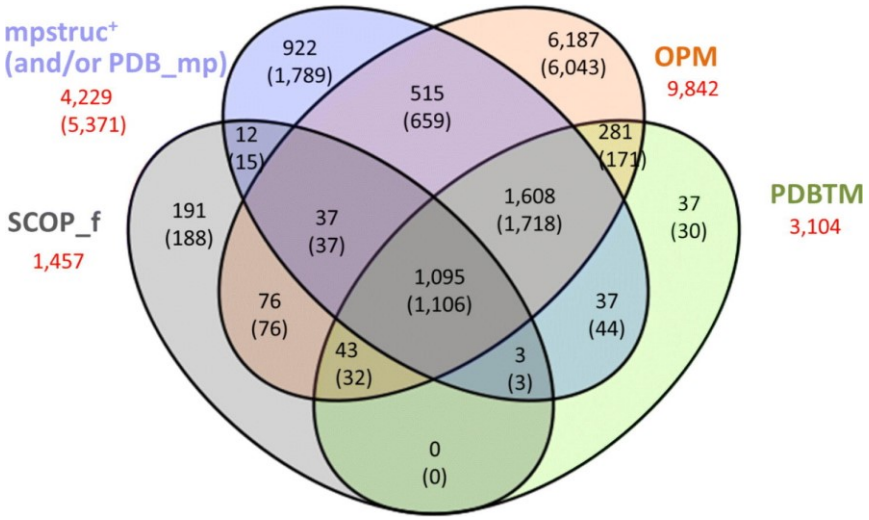


Рис. 1. Диаграмма Венна, показывающая перекрытия между множествами баз данных мембранных белков [6]

Тот факт, что структуры мембранных белков составляют всего 1–2% от общего числа белковых структур высокого разрешения, связан со сложностями работы с мембранными белками (в том числе сложностью в получении кристаллов мембранных белков для последующего применения рентгеноструктурного анализа). Одним из факторов, затрудняющих кристаллизацию белков (в том числе мембранных), является конформационная подвижность, степень которой возрастает по мере роста молекулярного веса (размера) белка. В данной работе, для каждого белка из описанного выше объединенного массива МБ был оценен размер водорастворимой части. На основе этих данных продемонстрировано, что разрешение структур, получаемых с помощью рентгеновской дифракции на белковых кристаллах, в среднем имеет тенденцию к ухудшению при увеличении размеров белка. Было показано, что характер зависимости разрешения от размеров белка одинаковый (в пределах погрешности) для двух наиболее распространенных методов кристаллизации МБ: в липидных кубических фазах (*in meso*) и в мицеллах детергента (*in surfo*). Таким образом, статистически, ни один из этих двух методов не может считаться *a priori* более предпочтительным для достижения лучшего разрешения.

Литература

1. *Newport T. D.* [et al.]. The MemProtMD database: a resource for membrane-embedded protein structures and their lipid interactions // Nucleic Acids Res. 2019. V. 47. P. 390–397.
2. Membrane Proteins of Known 3D Structure. URL: https://blanco.biomol.uci.edu/mpstruc/ (дата обращения 27.02.2024)
3. *Lomize M. A.* [et al.]. OPM database and PPM web server: resources for positioning of proteins in membranes // Nucleic Acids Res. 2012. V. 40. P. 370–376.
4. *Kozma D.* [et al.]. PDBTM: Protein Data Bank of transmembrane proteins after 8 years // Nucleic Acids Res. 2013. V. 41. P. 524–529.
5. *Andreeva A.* [et al.]. SCOP2 prototype: a new approach to protein structure mining // Nucleic Acids Res. 2014. V. 42. P. 310–314.
6. *Shimizu K.* [et al.]. Comparative analysis of membrane protein structure databases // Biochim Biophys Acta Biomembr. 2018. V. 1860. P. 1077–1091.

УДК 577.352.26

Подтверждение канальных свойств OLPVR1

С. М. Бухалович, В. В. Сударев, Д. В. Сидоров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

OLPVR1 (Organic Lake Phycodnavirus Rhodopsin) вместе с VirChR1 является частью первой группы вирусных родопсинов [1]. Эта группа имеет большое разнообразие, а ее представители отличаются от уже известных родопсинов. При экспрессии OLPVR1 в эукариотических клетках пока не удалось достичь цитоплазматической локализации. Это осложняет исследования с помощью метода локальной фиксации потенциала (patch-clamp). Показано, что OLPVR1 преимущественно остается в эндоплазматическом ретикулуме при этом оставаясь функциональным [2]. Его сходство с VirChR1 и другие данные [2] позволяют предположить его канальные свойства, однако до сих пор это не было продемонстрированно напрямую.

Для данной работы были наработаны, выделены и очищены OLPVR1 и VirChR1, с ними и с бактериородопсином HsBR собраны протеолипосомы (ПЛ). Мы установили канальные свойства OLPVR1 и подтвердили таковые для VirChR1 в исследованиях с помощью черных липидных мембран (БЛМ). После инкубации с протонофором при освещении мембраны с адсорбированными на БЛМ ПЛ с OLPVR1 и VirChR1 наблюдалось пропорциональное внешнему напряжению смещение фототока. При этом без внешнего напряжения ток оставался пренебрежимо малым, а контроль с HsBR демонстрировал по всей линейке напряжений положительный фототок. Это означает, что OLPVR1 и VirChR1 являются активируемыми светом протонными каналами.

Аналогичные исследования проводились ранее для канального родопсина ChR2 [3]. Однако для ChR2 требовалось нарабатывать белок в эукариотических клетках. Вирусные родопсины, обсуждаемые здесь, напротив экспрессируются в *E. coli*, что означает более дешевое и простое получение образцов. Хоть выход белка сравнительно более низкий нежели, например, для некоторых протеородопсинов, но получаемое количество достаточно для проведения исследований.

БЛМ используется как правило для характеризации ионных помп. Однако, как предложено в [3] с помощью этого метода возможно описывать и канальные свойства. Наша работа экспериментально подтверждает эту возможность. Данное обстоятельство помогло в обход стандартной характеризации с использованием patch-clamp, невозможной в этом случае, установить факт канальной активности OLPVR1.

Литература

1. *Zabelskii D.* [et al.]. Viral rhodopsins 1 are an unique family of light-gated cation channels // Nature communications. 2020. V. 11(1). P. 5707–5723.
2. *Eria-Oliveira A. S.* [et al.]. Hijacking of internal calcium dynamics by intracellularly residing viral rhodopsins // Nature Communications. 2024. V. 15(1). P. 65–76.
3. *Rokitskaya T. I.* [et al.]. Electrophysiological Characterization of Microbial Rhodopsin Transport Properties: Electrometric and ΔpH Measurements Using Planar Lipid Bilayer, Collodion Film, and Fluorescent Probe Approaches // Rhodopsin: Methods and Protocols. — New York: Springer, 2022. P. 259–275.

УДК 577.112

Исследование архитектуры активного центра тканевой трансглутаминазы человека методами *in silico*

***С. Д. Иващенко*[1,2], *Е. В. Зиновьев*[1], *А. В. Власов*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]РОСБИОТЕХ
[3]Объединенный институт ядерных исследований

Тканевая трансглутаминаза tTG человека — многофункциональный фермент, участвующий в различных заболеваниях, включая целиакию и неврологические расстройства [1,2]. Хотя было разработано несколько ингибиторов tTG, информация о молекулярных механизмах связывания белка с лигандами остается неполной из-за отсутствия структурных данных высокого разрешения в области его активного сайта. Чтобы провести точные компьютерные симуляции взаимодействия белок-лиганд, можно дополнить имеющиеся неполные структуры белка tTG современными *in silico* методами.

В работе исследуется структура открытой конформации тканевой трансглутаминазы tTG человека с использованием структур из базы данных Protein Data Bank (PDB) [3]. Было проведено сравнение четырех существующих неполных структур с PDB ID 2q3z, 3s3j, 3s3p, 3s3s, после чего была выбрана наиболее полная и точная модель белка (2q3z). Чтобы получить единую структуру белка tTG с известным расположением всех аминокислот, к выбранной модели был применен метод гомологичного моделирования программой Modeller; помимо этого, был использован алгоритм предсказания структуры, основанный на AlphaFold [4,5]. Активный центр с впервые разрешенной петлей, формирующей дополнительную полость, полученной полной структуры белка tTG был изучен на предмет образуемых с различными лигандами нековалентных связей, обеспечивающих комплементарность лигандов и белка. Был проведен молекулярный докинг известных ингибиторов белка в полученную полную структуру tTG программой Gnina для определения оптимальных параметров докинга при виртуальном скрининге [6].

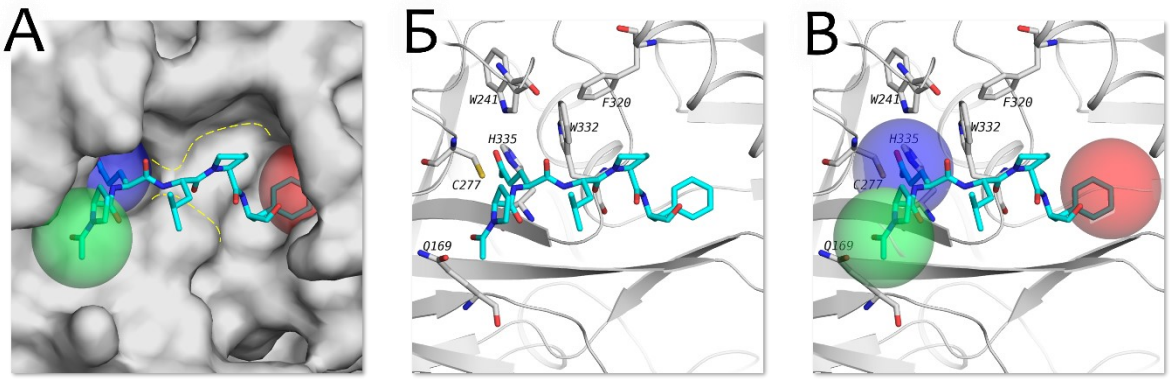


Рис. 1. Активный центр полученной полной модели тканевой трансглутаминазы. *А* — три полости активного центра показаны красным, синим и зеленым. Седлоподобная структура активного центра, формируемая обнаруженной петлей, показана желтым пунктиром. *Б* — аминокислотные остатки, формирующие полости активного центра. *В* — Сопоставление полостей и аминокислотных остатков в активном центре

Получена полная модель белка tTG с помощью предсказания на основании AlphaFold, а также с помощью гомологического моделирования в программе Modeller. На основании сравнения с исходными моделями из базы данных PDB по позициям ключевых для молекулярного механизма белка аминокислот выбрана модель белка, предсказанная с помощью AlphaFold; модель белка, полученная с помощью Modeller, признана неточной для исследования взаимодействия с лигандами. Обнаружено существенное дополнение архитектуры активного центра tTG в сравнении с полученными экспериментально моделями (ввиду неполной разрешенности структуры в активном сайте), выявлена дополнительная петля, влияющая на аффинность лигандов (рис. 1). С помощью молекулярного докинга соединений с позицией в активном центре, известной из экспериментально полученных структурных данных (молекулы ингибиторов, как и часть активного сайта, разрешены во всех четырех известных PDB структурах открытой конформации белка), подтверждена точность полученной полной модели tTG. Определены оптимальные вводные параметры молекулярного докинга программой Gnina: атом серы, ответственный за ковалентное связывание в активном центре (принадлежащий аминокислотному остатку C277), должен быть удален из

модели, докинг должен проводиться с подвижным аминокислотным остатком Q169, и параметр exhaustiveness должен быть не менее 32 для достижения наиболее точного предсказания позиции лиганда в активном центре.

Литература

1. *Iversen R., Sollid L. M.* Transglutaminase 2 and Celiac Disease. // Transglutaminases. 2015. P. 193–214.
2. *Wilhelmus M. M. M.* [et al.]. The Transglutaminase-2 Interactome in the APP23 Mouse Model of Alzheimer's Disease // Cells. 2022. V. 11(3): 389.
3. *Berman H. M.* The Protein Data Bank // Nucleic Acids Research. 2000. V. 28(1). P. 235–242.
4. *Webb B., Sali A.* Comparative Protein Structure Modeling Using MODELLER // Current Protocols in Bioinformatics. 2016. V. 54(1). P. 5.6.1–5.6.37.
5. *Mirdita M.* [et al.]. ColabFold: making protein folding accessible to all // Nature Methods. 2022. V. 19(6). P. 679–682.
6. *McNutt A. T.* [et al.]. GNINA 1.0: molecular docking with deep learning. // Journal of Cheminformatics. 2021. V. 13(1). P. 1–20.

УДК 521.27

Получение изображения сосудов, ассоциированных с дыхательными путями, на основе спектра генераций вторых гармоник

***С. А. Портнов*[1,2], *С. С. Шаляпин*[1,2], *А. О. Богородский*[3], *В. И. Борщевский*[3], *М. А. Шевченко*[1]**

[1]Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН
[2]Национáльный исследовательский ядерный университет МИФИ

[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нелинейная микроскопия на основе генерации второй гармоники (ГВГ) широко применяется в биологии и биомедицине для визуализации структурных компонентов тканей организмов [1]. ГВГ микроскопия реализуется на базе мультифотонной микроскопии, что позволяет получать изображения толстых срезов тканей и даже органов мелких лабораторных животных на глубине до 500 мкм. Кроме того, мультифотонная микроскопия позволяет использовать флуоресцентные метки в комбинации с ГВГ, что способствует получению более полной морфологической картины [2].

Для формирования ГВГ электромагнитная волна должна пройти через анизотропную структуру, в результате чего происходит процесс поляризации среды. При этом возникает поляризованность — суммарный дипольный момент в единице объема вещества [3].

$$E \sim E_m \cos(wt). \quad (1)$$

В нелинейной среде поляризованность:

$$P \sim E, E^2, \text{а } E^2 \sim E_m^2 cos^2(wt) \ (2),$$

где

$$cos^2(wt) = \frac{1 + \cos(2wt)}{2} \ (3),$$

где P — поляризованность, E — напряженность электромагнитной волны.

Получается, дипольные моменты излучают вторичные волны, пропорциональные E и E^2, которые в свою очередь пропорциональны $\cos(wt)$ и $\cos(2wt)$ соответственно.

Основными белковыми структурами, способствующими формированию ГВГ являются такие белки, как фибриллярный коллаген и миозин, формирующий мышечные волокна [4]. При помощи ГВГ проводят оценку состояния гладкой мускулатуры в норме и при патологических состояниях.

В данной работе на основе комбинации ГВГ и флуоресцентно-меченного биотина была проведена визуализация бронхиального дерева и крупных сосудов, ассоциированных с дыхательными путями. Для визуализации дыхательных путей использовали стрептавидин, конъюгированный с AlexaFluor 488 (эмиссия 515±30 нм), который возбуждали мультифотонным лазером с частотой 1030 нм. ГВГ наблюдали в диапазоне 540–570 нм (рис. 1).

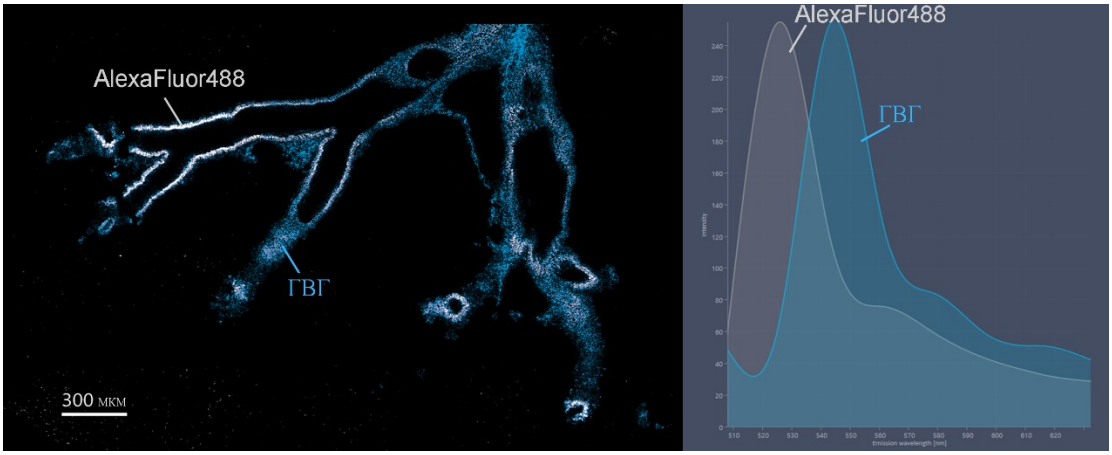


Рис. 1. Спектры испускания AlexaFluor 488 и ГВГ, полученные при обработке изображения

Немаловажную роль при микроскопии тканей играет обработка изображений, позволяющая избавиться от шумов и аутофлуоресценции тканей [1]. В данной работе обработку изображений проводили при помощи программного обеспечения ZEN (Zeiss) и Imaris (Oxford Instruments). Поверхность, построенная на основе изображения в канале AlexaFluor 488, представляла собой поверхность бронхиального дерева. Поверхность на основе изображения в канале ГВГ включала в себя как бронхиальное дерево, так и систему сосудов, ассоциированных с дыхательными путями, как показано на рис. 2 (левое изображение).

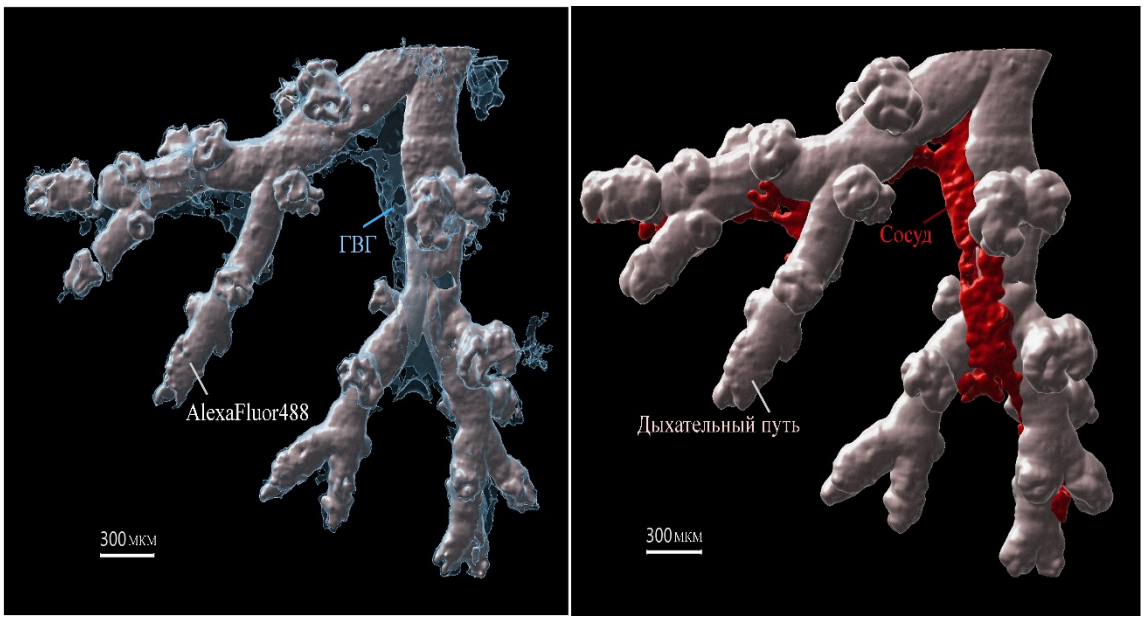


Рис. 2. Поверхности, построенные на основе изображений стрептавидина-AlexaFluor 488 и ГВГ до (слева) и после (справа) разделения

С целью выделить сосуды из поверхности, построенной на основе изображения в канале ГВГ и включающей как сосуды, так и дыхательные пути, поверхности были сегментированы. Маски поверхностей были обработаны при помощи программного обеспечения FIJI с использованием функций: “Fill holes”, “Dilate” и “Chanel Subtraction”. Полученные после разделения поверхности показаны на рис. 2 (левое изображение).

Таким образом, в данной работе было показано, что с использованием комбинации флуоресцентного окрашивания и ГВГ при помощи мультифотонной микроскопии тотального препарата легкого мыши возможно визуализировать дыхательные пути и сосуды. Данный подход позволит в дальнейшем идентифицировать точное положение патогенов и клеток иммунной системы в процессе воспаления.

Литература

1. *Дуденкова В. В.* [и др.]. Оценка структуры и состояния коллагена по сигналу генерации второй гармоники // Успехи биологической химии. 2019. Т. 59. С. 181–218.

2. *Borile G.* [et al.]. Label-Free Multiphoton Microscopy: Much More Than Fancy Images // Int. J. Mol. Sci. 2021. V. 5(22) :2657. DOI: 10.3390/ijms22052657.
3. *Савельев И. В.* Курс общей физики. — М.: Астрель, 2003.
4. *Лефорт К.* [и др.]. Многоцветная многофотонная микроскопия на основе наносекундного источника суперконтинуума // Фотоника. 2020. Т. 14. № 1. С. 88–95. DOI: 10.22184/1993-7296.FRos.2020.14.1.88.94.

УДК 577.322.5

Исследование олигомеризации трансмембранного домена рецептора RAGE при внесении соматической мутации методом ЯМР-спектроскопии

***С. М. Долотова*[1,2], *Я. В. Бершацкий*[1,2], *В. А. Лушпа*[1,2], *Д. Д. Плащинская*[1,2], *И. С. Охрименко*[1], *Э. В. Бочаров*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт биоорганической химии им. акад. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

Рецептор конечных продуктов гликирования RAGE — это мультилигандный рецептор, вовлеченный в патогенез множества болезней, связанных с воспалением: рак, болезни Альцгеймера и Паркинсона, COVID-19, диабет [1]. В норме RAGE экспрессируется во всех тканях при развитии организма, но при достижении зрелости экспрессия остается только в нервной и легочной ткани. При возникновении воспаления RAGE может быть активирован множеством лигандов, например, белками S100, интерлейкинами, амилоидами — молекулами, накапливающимися в очаге воспаления. Рецептор активирует несколько сигнальных каскадов, помогающих снижать воспаление на начальных стадиях, но при продолжительном течении болезни повышается экспрессия самого RAGE, что приводит к чрезмерной активации клеток и их последующей дисфункции. Таким образом, воспаление усиливается по механизму положительной обратной связи, усугубляя патологию заболевания. Для снижения подобной реакции требуется найти молекулы, способные блокировать молекулярный механизм действия белка.

RAGE состоит из большого внеклеточного домена, одной трансмембранной спирали и внутриклеточного неупорядоченного хвоста [1]. На данный момент известны структуры только вне- и внутриклеточных доменов [1, 2]. Чтобы установить точный молекулярный механизм передачи сигнала внутрь клетки, требуются данные о структуре трансмембранного домена и о его способности к олигомеризации [3]. Трансмембранный домен имеет консервативный мотив GxxxG, который отвечает за взаимодействие двух α-спиральных трансмембранных доменов похожих белков [1]. Появление мутаций внутри этого мотива может повлиять на способность белка образовывать олигомеры, а значит, и на способность рецептора передавать сигнал внутрь клетки. Для решения задач подобного рода широко используются методы гетероядерной ЯМР-спектроскопии, позволяющие получать информацию не только о структуре, но и о динамике биомолекул, в том числе и об олигомерном состоянии белков [4].

Целью настоящей работы является получение структурно-динамических данных о трансмембранном домене RAGE. Для достижения данной цели методом бесклеточной экспрессии были получены тотально ^{13}C,^{15}N-изотопно-меченые пептиды $RAGE_{335\text{-}368}$ и его мутантная форма G349R. Мутация расположена внутри консервативного мотива GxxxG. Пептиды были очищены с помощью никель-аффинной хроматографии и встроены в мицеллы додецилфосфохолина — простейшую мембрано-имитирующую систему. Были накоплены гетероядерные ЯМР-спектры для решения структуры полученных белков. Полученные данные свидетельствуют о том, что внесенная мутация действительно снижает способность трансмембранного домена к олигомеризации, и консервативный мотив GxxxG действительно участвует в этом процессе.

Работа была поддержана Российским научным фондом (проект № 23-74-00024).

Литература

1. *Yatime L., Andersen G. R.* Structural insights into the oligomerization mode of the human receptor for advanced glycation end-products // FEBS J. 2013. V. 280(24). P. 6556–6568.
2. *Rai V.* [et al.]. Signal Transduction in Receptor for Advanced Glycation End Products (RAGE) // J. Biol. Chem. 2012. V. 287(7). P. 5133–5144.
3. *Fritz G.* RAGE: a single receptor fits multiple ligands // Trends Biochem. Sci. 2011. V. 36(12). P. 625–632.
4. *Mineev K. S.* [et al.]. NMR-based approach to measure the free energy of transmembrane helix–helix interactions // Biochim. Biophys. Acta Biomembr. 2014. V. 1838(1). P. 164–172.

УДК 577.322.4

Основанный на AlphaFold алгоритм предсказывает стехиометрию роторного кольца АТФ-синтазы F-типа от 8 до 27 протомеров

***С. Д. Осипов*[1], *Е. В. Зиновьев*[1], *А. А. Анучина*[1], *А. Кузьмин*[1], *А. В. Минаева*[1], *Ю. Л. Рижиков*[1,2], *А. В. Власов*[1,2], *И. Ю. Гущин*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

АТФ-синтазы — это крупные белковые комплексы, присутствующие в каждой живой клетке и производящие аденозинтрифосфат — универсальную единицу энергии для большинства биохимических процессов. АТФ-синтазы состоят из мембранного и растворимого доменов, каждый из которых содержит несколько субъединиц. Мембранная часть содержит олигомерное роторное кольцо (c-ring), стехиометрия которого определяет соотношение между количеством синтезируемых молекул АТФ и количеством ионов, транспортируемых через мембрану. В настоящее время экспериментально исследованы комплексы c-ring АТФ-синтаз F-типа со стехиометрией от 8 до 17 (кроме 16). Мы предлагаем простой подход, основанный на AlphaFold, который позволил нам оценить стехиометрию всех гомоолигомерных комплексов c-ring, последовательности которых присутствуют в геномных базах данных.

Мы проверили этот подход на имеющихся экспериментальных данных, и получили корреляцию до 0,94, а затем использовали его для предсказания существования комплексов c-ring со стехиометрией, варьирующейся от 8 до 27.

Для дополнительной проверки наших оценок, мы использовали моделирование методом молекулярной динамики двух комплексов c-ring со стехиометрией выше 17. Наша работа убедительно свидетельствует о существовании роторных колец с ранее неописанной высокой стехиометрией в природных организмах и подчеркивает полезность подходов, основанных на AlphaFold[1], для изучения гомоолигомерных белков.

А. В. благодарит Российский научный фонд (РНФ) (проект 22-74-00044) за поддержку работ, связанных со структурным анализом. И. Г. благодарит Министерство науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-03-2023-106, проект FSMG-2021-0002) за поддержку работ, связанных с моделированиием структуры.

Литература

1. *Jumper J* [et al.]. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold // Nature. 2021. V. 596(7873). P. 583–589.

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

Председатель: Н. Н. Колачевский (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: С. Ю. Савинов (д. ф.-м. н., доцент), В. С. Лебедев (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: К. С. Кислов, С. С. Моритака

Дата: 01–02.04.2024 Время: 11:00

УДК 539.2

Усиление эффективности лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии синтетических опаловых матриц с помощью плазмонных частиц

***А. Н. Маресев*[1,2], *М. А. Шевченко*[1], *Н. В. Чернега*[1], *С. Ф. Уманская*[1], *М. А. Карпов*[1], *А. Д. Кудрявцева*[1], *В. В. Воронова*[1]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет

Синтетические опаловые матрицы — это один из примеров трехмерных фотонных кристаллов. Одно из главных их преимуществ — простой и дешевый метод самосборки, не требующий для реализации сложного и дорого оборудования. Более того, опаловые матрицы являются базой для создания инвертированных опаловых матриц, наноструктур, представляющие собой среду из любого материала с многочисленными упорядоченными шаровыми полостями воздуха одинакового размера. Возможные сферы применения данных систем широки: от медицины до хранения энергии [1, 2].

Примеси, содержащиеся в синтетических опаловых матрицах, могут значительно повлиять на электрические, оптические и механические свойства всей системы в целом. Для контроля их состава может быть использован метод лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (ЛИЭС), заключающийся в измерении спектра плазмы, вызванной лазерным пробоем на поверхности материала. В дальнейшим, в полученном спектре определяются линии, соответствующие отдельными атомам. Ранее было показано, что этот метод позволяет находить в синтетических опалах не только примесные элементы, но и вещества, инфильтрованные в поры матриц [3]. Кроме того, интенсивность линий спектра растет при приближении частоты лазера, возбуждающего плазму, к запрещенной фотонной зоне.

Большая часть ЛИЭС исследований направлена на уменьшение требуемой лазерной энергии для регистрации элементного состава. Среди всех возможных решений этой задачи выделяется использование наноразмерных металлических частиц, наносимых на поверхность изучаемого образца [4]. При совпадении частоты лазерного излучения с частотой локализованного плазмонного резонанса электромагнитное поле вблизи частиц усиливается, что приводит к сильному нагреву исследуемого образца, который локализуется в месте его соприкосновения с частицами. Если энергия излучения достаточно велика, то в этих точках генерируется плазма. Кроме того, при отдаленности частоты лазера от частоты резонанса генерация все еще может происходить благодаря электронам, перемещающимся между частицами в силу различных эффектов [5].

С использованием описанного метода применительно к синтетическим опаловым матрицам и частицам серебра размером 200 нм получены следующие результаты. Путем моделирования взаимодействия двух серебряных наночастиц методом конечных элементом исследовано распределения электрического поля (рис. 1). Отношение максимальной величины электрического поля в системе к изначальному падающему полю резко растет с уменьшением расстояния между частицами. Более того, максимум поля находится между частицами. Самое большое отношение зафиксировано для длины волны излучения 1064 нм из рассмотренных. Тем самым были определены наиболее оптимальные значения двух параметров для усиления спектра ЛИЭС: расстояния между частицами и частотой падающего излучения.

Влияние серебряных частиц на интенсивность спектра опаловой матрицы изучалось по интенсивности спектральных линий 252,8 нм и 288,5 нм, относящимся к наиболее стабильным атомным линиям кремния. Получены спектры для трех длин волн падающего на мишень поля (355 нм, 532 нм, 1064 нм) с одинаковой плотностью энергии 60 ГВт/см2 и размером лазерного пятна 500 мкм на поверхности (рис. 2, представлен только график для падающей длины волны 532 нм). Число серебряных частиц в области взаимодействия излучения и вещества оценивается в $4 \cdot 10^4$. Во всех случаях зафиксировано многократное увеличение интенсивности исследуемых линий: для 355 нм пик вырос в 1,7 раз, для 532 нм — в 6,8 раз, для 1064 нм — в 17,4 раз.

Таким образом нанесение серебряных частиц на поверхность опаловой матрицы позволило увеличить эффективность ЛИЭС в несколько раз. Данный эффект позволяет детектировать меньшие объемы примесей в синтетических опалах, а также более точно исследовать состав инфильтрованных в них веществ. Кроме того, результаты позволяют предположить, что тонкие металлические пленки на основе инвертированных опалов могут быть использованы в качестве подложек для усиления спектра ЛИЭС при анализе состава нанесенных на них веществ.

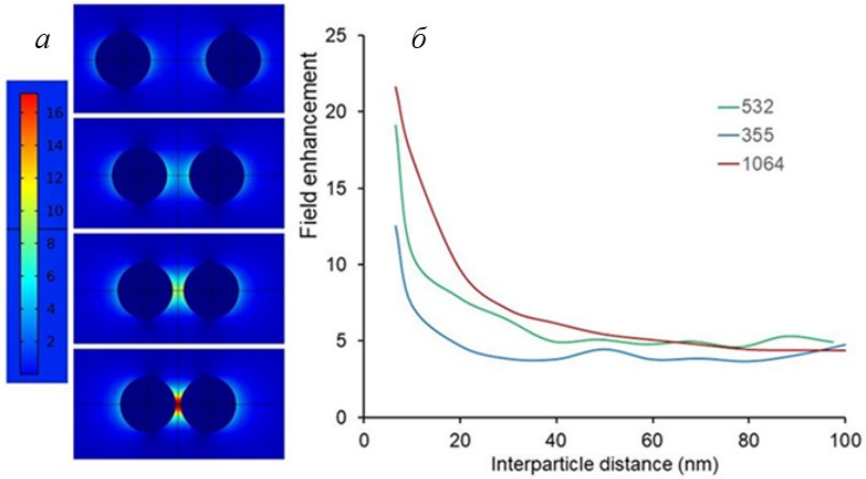


Рис. 2. Распределение электрического поля при разном расстоянии между серебряными частицами (*а*); графики усиления поля от расстояния между частицами для разных длин волн падающего излучения (*б*)

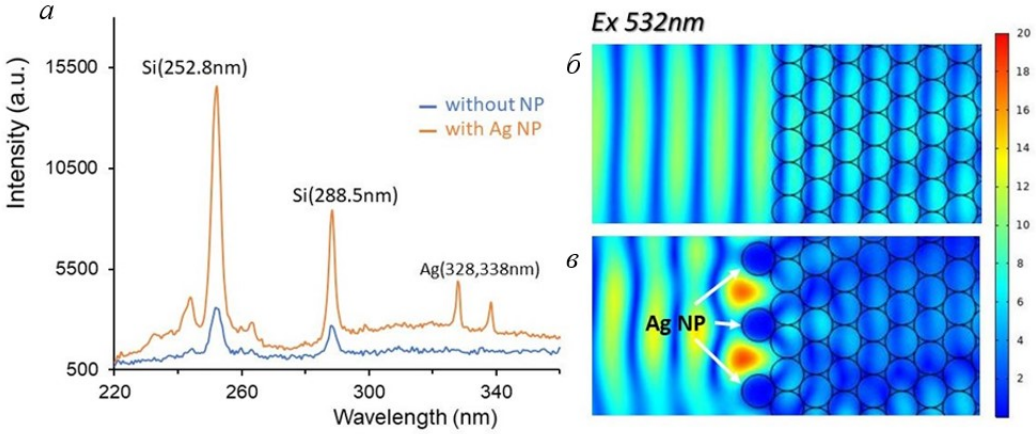


Рис. 3. Спектры ЛИЭС, возбуждаемые длиной волны 532 нм, без частиц серебра и с их применением (*а*). Распределение поля вблизи поверхности опала на чистой поверхности (*б*) и на поверхности с наночастицами серебра (*в*)

Литература

1. *Lu M.* [et al.]. Black phosphorus hydrogel inverse opal microneedle patches for psoriasis treatment // Nano Today. 2024. V. 54: 102072.
2. *Kim D.* [et al.]. 3D inverse-opal structured $Li_4Ti_5O_{12}$ Anode for fast Li-Ion storage capabilities // Electronic Materials Letters. 2017. V. 13. P. 505–511.
3. *Skrabatun A. V.* [et al.]. Synthetic Opals in Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Problems // Physics of Wave Phenomena. 2023. V. 31(1). P. 51–58.

4. *De Giacomo A.* [et al.]. Perspective on the use of nanoparticles to improve LIBS analytical performance: nanoparticle enhanced laser induced breakdown spectroscopy (NELIBS) // Journal of Analytical Atomic Spectrometry. 2016. V. 31(8). P. 1566–1573.
5. *Dell'Aglio M.* [et al.]. Nanoparticle enhanced laser induced breakdown spectroscopy (NELIBS), a first review // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. 2018. V. 148. P. 105–112.

УДК 535.37, 544.18, 548.4

Исследование поляризации ядерного спина азотно-вакансионных центров в алмазе с помощью спин-обменных переходов в перпендикулярном поле

***А. Чернявский*[1,2,4], *Е. А. Примак*[1,2], *А. М. Козодаев*[3], *В. В. Сошенко*[4], *П. Г. Вилюжанина*[2,3], *С. М. Дрофа*[1,2], *В. Н. Сорокин*[4], *С. В. Большедворский*[4], *И. С. Кожокару*[2,4], *А. Н. Смолянинов*[5], *А. В. Акимов*[2,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
[4]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[5]ООО «Сенсор Спин Технолоджис»

Центры окраски в алмазе являются хорошими претендентами на роль платформы для квантовых вычислений, а также квантовых сенсоров магнитного поля, вращений [1] и температуры [2]. Во многом это возможно благодаря тому, что спиновое состояние электронов NV-центра сохраняется достаточно долгое время для того, чтобы было возможно его инициализировать, изменять и считывать с помощью оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР). Ядерные состояния NV-центра используются для реализации сенсора вращения. Поэтому важно иметь способ подготовки данных состояний. Один из способов инициализации ядерного спина в определенном состоянии — спин-обменные переходы, вероятность которых возрастает, если использовать поперечное по отношению к оси NV магнитное поле [3]. В данной работе был предложен протокол для поляризации ядерного спина и исследованы процессы, ограничивающие поляризацию.

Идея поляризации ядерного спина состоит в следующем: сначала длинный лазерный импульс поляризует ансамбль NV центров в состояние с проекцией электронного спина равной нулю. Затем пи-импульс спин-обменного перехода переносит населенность на уровень с проекцией электронного спина +1 и проекцией ядерного спина равной нулю. После этого еще один лазерный импульс поляризует все в состояние с проекцией электронного спина равной нулю, для того чтобы в последствии измерить распределение населенностей ядерных уровней. Данная последовательность работает благодаря тому, что лазерное излучение медленно разрушает состояние ядерного спина.

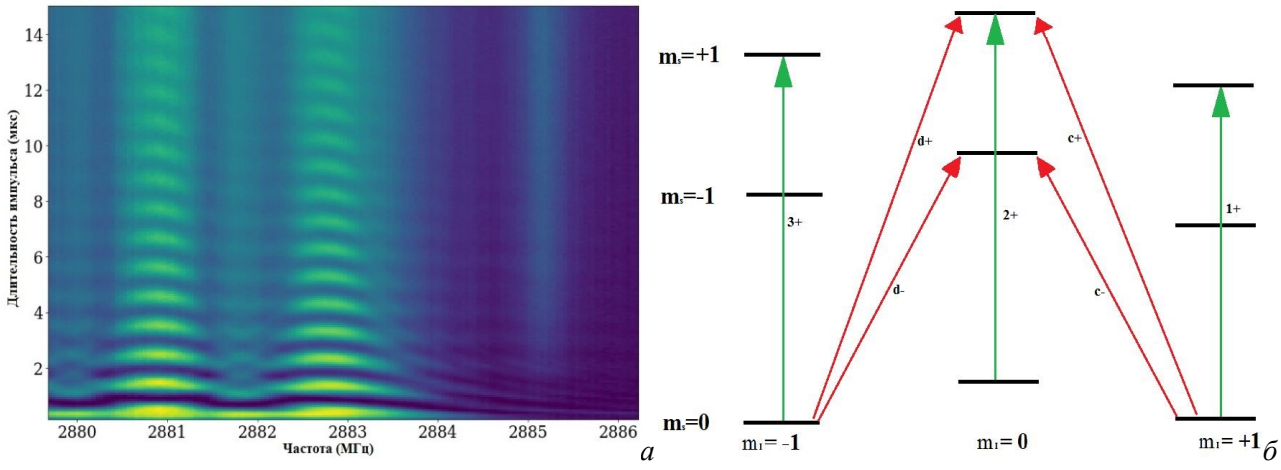


Рис. 1. Карта флюоресценции (*а*) при наблюдении Раби осцилляций на переходах 3+ и 2+ с сохранением ядерного спина (слева и по центру) и спин-обменный переход c+(справа). Желтые участки соответствуют наибольшему переносу населенности на верхние уровни. Схема уровней основного состояния NV-центр (*б*). По вертикальной оси: проекция электронного спина. По горизонтальной оси: проекция ядерного спина

Для реализации этой схемы были найдены частоты спин-обменных переходов и время пи-импульса для перехода c+ рис. 1. Было предложено подавать на систему два пи-импульса один из которых соответствует переходу c+, другой переходу c–. Это привело к тому что населенность уровня с нулевой проекцией ядерного спина увеличилась, а населенность уровней с проекциями ядерного спина +1 и –1 уменьшилась. Для измерения населенности производится измерение спектра ОДМР, в котором населенности ядерных подуровней связаны с амплитудой соответствующих спектральных линий.

На рис. 2 представлен результат эксперимента, в котором была достигнута степень поляризации около 48%. Для нахождения степени поляризации данные были приближены суммой трех Лоренцевых контуров, степень поляризации есть отношение площади под одной кривой к сумме площадей под всеми тремя кривыми.

Основным препятствием для получения большей степени поляризации является наличие лазерного излучения, которое приводит к возбуждению электронов на уровень с ненулевым орбитальным моментом, из-за этого увеличивается сверхтонкое взаимодействие. Помимо этого, поляризацию ограничивает тот факт, что осцилляции Раби затухают, из-за этого населенность переносится не полностью. Еще одной проблемой является то, что ширина пи-импульса, подаваемого на систему меньше ширины линии перехода, что приводит к тому, что электромагнитная волна взаимодействует не со всеми NV-центрами ансамбля. Дальнейшим продолжением работы будет оптимизация микроволнового импульса, а также поиск оптимального угла наклона поля.

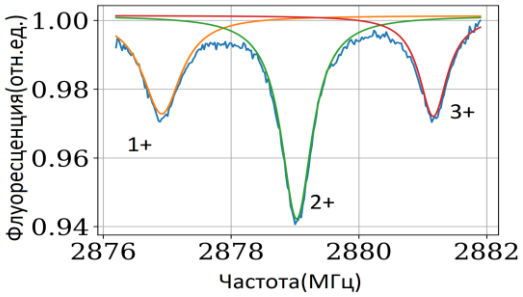


Рис. 2. ОДМР спектр сильных переходов после поляризации в состояние с нулевой проекцией ядерного спина

Литература

1. *Kucsko G.* [et al.] Nanometre-scale thermometry in a living cell // Nature. 2013. V. 500. P. 54–58.
2. *Soshenko V. V.* [et al.] Nuclear spin gyroscope based on the nitrogen vacancy center in diamond // Physical Review Letters. 2021. V. 126: 197702.
3. *Huillery P.* [et al.] Coherent microwave control of a nuclear spin ensemble at room temperature // Physical Review B. 2021. V. 103: L140102.

УДК 535.8

Матричная изоляция атомов тулия в аргоне при криогенных температурах

А. С. Шульмина, А. А. Двуреченский, Д. И. Проворченко, Д. А. Мишин, Д. О. Трегубов, А. А. Головизин

Физический институт им. П. Н. Лебедева

Современный мир трудно представить без квантовых технологий. Переходы с узкой шириной линии открывают еще большие перспективы этой области. Тулий, являясь лантаноидом, имеет незаполненную 4f оболочку, которая лежит внутри 5s, 5p и 6s оболочек, расположенных близко к ядру. Из-за этого магнитный дипольный переход на длине волны 1140 нм в значительной степени экранирован от ряда внешних возмущений. Этот эффект позволяет имплантировать тулий в матрицы инертного газа без существенного уширения спектральной линии данного перехода. Такие матрицы при низких температурах [1] позволят использовать систему в качестве квантовых сенсоров для ряда физических величин, например, магнитного поля.

Для имплантации атомов в кристаллы инертных газов широко применяется метод, известный как матричная изоляция: оптически активные частицы внедряются в инертные твердые вещества путем их конденсации при низких температурах [2]. Матрица-хозяин представляет собой твердую фазу инертного газа, в которую встроены частицы-гости (атомы, молекулы, ионы и т.д.). Когда атомы совместно

конденсируются с матрицей-хозяином при низких температурах, можно считать, что они эффективно удерживаются неподвижными в нейтральной среде. Изолированные атомы не диффундируют, следовательно не вступают ни в какие реакции, кроме как с матрицей-хозяином. Так как взаимодействие с матрицой-хозяином вызывает смещение энергий в захваченных атомах, необходимо использовать инертные газы. Например, аргон и неон могут быть легко переведены в твердую фазу ниже их температур плавления без необходимости применения высоких давлений. Это означает, что если подложка охлаждена ниже температуры плавления, то данные газы могут быть сконденсированы в кристаллическую структуру путем напыления их на подложку. Также аргон и неон прозрачны в видимой и ближней инфракрасной областях.

В данной работе рассматривается метод матричной изоляции атомов тулия в аргон. В качестве подложки было взято сапфировое стекло. Также теоретически был проанализирован метод роста толщины кристалла с помощью тонкопленочной интерференции. Из-за интерферирующих лучей, отраженных от растущей матрицы, регистрируется сигнал в виде осцилляций, вид которых зависит от поляризации лазерного излучения.

Литература

1. *Gaire V., Raman C. S., Parker C. V.* Subnanometer optical linewidth of thulium atoms in rare-gas crystals // Phys. Rev. A. 2019. V. 99(2): 022505.
2. *Dunkin I. R.* Matrix-Isolation Techniques. — Oxford: Oxford University Press, 1998.

УДК 535.35

Расчет электронных термов и сил осцилляторов переходов валентно-связанного аниона CH_2CN^-

***А. В. Мекшун*[1,2], *А. А. Нариц*[1]**

[1]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В различных областях атомно-молекулярной и химической физики в настоящее время активно исследуются процессы, проходящие с участием молекулярных анионов. Взаимодействие отрицательных ионов с нейтральными и заряженными частицами, а также с электромагнитным полем существенно влияет на динамику элементарных процессов, протекающих в межзвездной среде, слабоионизированной плазме и тканях живых существ.

Молекулярные анионы характеризуют типом связи внешнего электрона с нейтральным остовом. В валентно-связанных анионах электрон удерживается валентными связями, а энергия сродства составляет несколько эВ. Наряду с валентно-связанными молекулярными анионами значительный интерес представляют дипольно-связанные анионы (ДСА) с закритическим дипольным моментом $D > D_{\text{cr}}$. Величина $D_{\text{cr}} = 1.625$ Д в модели точечного диполя и $D_{\text{cr}} \sim 2.5$ Д при учете вращения молекулярного остова [1]. Энергии связи ДСА составляют $E_b \sim 1 - 10$ мэВ, что приводит к диффузному характеру волновой функции ДСА, пространственные размеры которой варьируются от нескольких десятков до сотен боровских радиусов. Отмеченные особенности существенно влияют на динамику элементарных процессов с участием ДСА [2]. В межзвездной среде резонансы в спектрах излучения молекулярных анионов могут быть связаны с процессом фотоотрыва электрона с участием их колебательно-вращательных степеней свободы [3]. Некоторые радикалы способны образовывать как валентно-связанные, так и дипольно-связанные отрицательные ионы. Поэтому для самосогласованного описания экспериментальных данных по фотоотрыву и столкновительным процессам с учетом колебательно-вращательной структуры нейтрального остова необходимо иметь обширные данные о поверхностях потенциальной энергии анионов.

В данной работе выполнены расчеты основного и первых возбужденных валентных электронных термов аниона CH_2CN^- методом связанных кластеров (CCSD(T)) для широкого диапазона геометрических параметров [4]. На Рис. 1 представлено схематическое изображение равновесной геометрии аниона CH_2CN^-. Было показано, что отклонение системы от плоской геометрии радикала CH_2CN составляет двугранный угол $\gamma = 10^{\text{o}}$, что значительно меньше величины, полученной в работе [5]. На основании полученных численных данных рассчитаны силы осцилляторов переходов между основным и первыми возбужденными квазистационарными электронными состояниями. Полученные результаты свидетель-

ствуют о высокой эффективности канала фотоотрыва электрона от валентного аниона, реализующегося через заселение автоотрывных состояний.

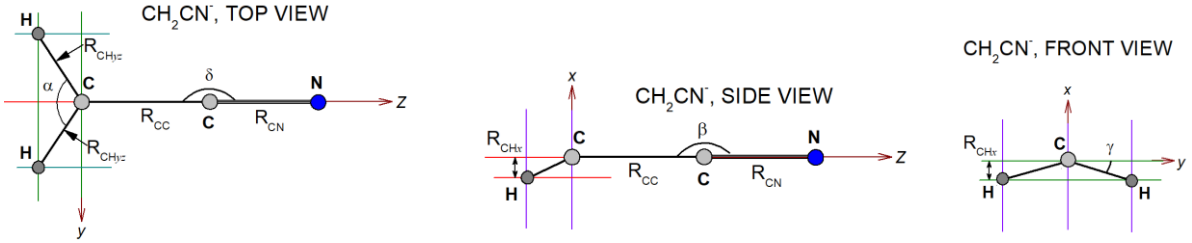


Рис. 1. Структура аниона CH_2CN^- [4]

Таким образом, в работе проведены расчеты, существенно уточняющие параметры равновесной геометрии, а также энергетические характеристики валентного аниона CH_2CN^-. Представлены данные по энергии основного и двух первых возбужденных электронных состояний, а также сил осцилляторов переходов. Полученные результаты важны для экспериментов по исследованию динамики фотоотрыва электрона от аниона CH_2CN^-, а также для интерпретации астрофизических данных.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант No. 19-79-30086).

Литература

1. *Jordan K. D., Wang F.* Theory of dipole-bound anions // An. Rev. Phys. Chem. 2003. V. 54(1). P. 367–396.
2. *Lebedev V. S., Narits A. A.* Long-range interaction effects in a formation of dipole-bound anions induced by collisions of Rydberg atoms with polar molecules // Chem. Phys. Lett. 2013. V. 582(4). P. 10–14.
3. *Laws B. A.* [et al.]. Velocity Map Imaging Spectroscopy of the Dipole-Bound State of CH_2CN^-: Implications for the Diffuse Interstellar Bands // J. Am. Chem. Soc. 2021. V. 143(44). P. 18684–18692.
4. *Mekshun A. V., Narits A. A.* Electronic Terms and Spectral Properties of Valence-Bound Anion of CH_2CN Molecule // Bull. Lebedev Phys. Inst. 2023. V. 50(12). P. 581–588.
5. *Lyle J.* [et al.]. Channel branching ratios in CH_2CN^- photodetachment: Rotational structure and vibrational energy redistribution in autodetachment // J. Chem. Phys. 2017. V. 147(23): 234309.

УДК 662.612.31

Исследование диффузионно-тепловой неустойчивости предварительно перемешанных пламен, стабилизированных на плоской пористой горелке

***Е. Д. Губарев*[1], *Е. В. Серещенко*[2], *В. В. Губернов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

Данная работа посвящена исследованию устойчивости и динамики распространения фронта волны горения предварительно перемешанных смесей газов, стабилизированного на плоской пористой горелке в диффузионно-тепловом приближении. В работе используется модель глобальной одностадийной кинетики в приближении бесконечно узкого фронта реакции, которая значительно проще всех известных подходов, однако дает разумные качественные результаты. Как и модели с детальными механизмами, сравнение которых проведено в работе [1], она описывает переход от стационарного режима распространения фронта горения к его осцилляциям при уменьшении скорости истечения свежей смеси топлива из горелки [2]. Такое описание позволяет значительно снизить сложность вычислений благодаря уменьшению количества рассматриваемых процессов и, как следствие, числа уравнений. Определение критических параметров, при которых меняется поведение решений, с помощью простой модели позволяет увеличить производительность сложных вычислений в моделях с детальной кинетикой химических реакций за счет сужения области исследуемых параметров.

Рассматриваемая математическая модель описывает пламя, стабилизированное на плоской пористой горелке, исследование которого может быть выполнено в лабораторных условиях [3]. Сравнение результатов с экспериментальными данными позволяет проверять и корректировать детальные реакционные механизмы.

В рамках используемой модели в двумерном случае пламя описывается системой уравнений на положение фронта $F(y)$ и его температуру $T_F(y)$, которые в безразмерном виде записываются следующим образом [2]:

$$F_t = \frac{1}{Le}F_{yy} + aF_y^2 + \psi_1(F, T_F)$$

$$T_{Ft} = T_{Fyy} + bF_{yy} + cF_y^2 + dF_yT_{Fy} + \psi_2(F, T_F)$$

Коэффициенты a, b, c, d и χ в этих уравнениях:

$$a = \frac{m}{2(1 - e^{-mLeF})} - m$$

$$b = \frac{m(1-\sigma)(1-Le)\chi}{Le(\chi+1)}$$

$$c = \frac{(1-\sigma)m(a\chi - m)}{(\chi+1)} + \frac{(1-\sigma)^2m^2\chi}{(\chi+1)(T_F-\sigma)}$$

$$d = -\frac{(1-\sigma)m\chi}{(\chi+1)(T_F-\sigma)}$$

$$\chi = \operatorname{cth}\left(\frac{mF}{2}\right) - \frac{mF}{2\operatorname{sh}^2\left(\frac{mF}{2}\right)}$$

Функции $\psi_1(F, T_F)$ и $\psi_2(F, T_F)$ имеют вид

$$\psi_1(F, T_F) = \frac{m - U(T_F)}{1 - e^{-mLeF}}$$

$$\psi_2(F, T_F) = \frac{\Phi + m(1-\sigma)\psi_1\chi}{1+\chi},$$

где введена вспомогательная функция $\Phi(F, T_F) = (1-\sigma)mU(T_F) - \frac{m^2}{2}\left(1 + \operatorname{cth}\left(\frac{mF}{2}\right)\right)(T_F - \sigma)$ и безразмерная адиабатическая скорость пламени $U(T_F) = e^{\frac{N}{2}\left(1-\frac{1}{T_F}\right)}$

Здесь F — безразмерная координата фронта, T_F — безразмерная температура на фронте пламени. m — безразмерная скорость истечения смеси из горелки, $Le = \frac{D_{mol}}{D_{th}}$ — число Льюиса — отношение коэффициента диффузии смеси D_{mol} к коэффициенту ее теплопроводности D_{th}, σ — безразмерная температура свежей смеси, N — безразмерная энергия активации. Все величины размерности длины обезразмерены на тепловую толщину пламени $L_{th} = \frac{D_{th}}{U_b}$, где U_b — адиабатическая скорость распространения плоского пламени. Время измеряется в величинах $\frac{D_{th}}{U_b^2}$. Скорость измеряется в единицах U_b. Температура шкалируется на адиабатическую температуру пламени.

Уравнения решались численно с использованием явной схемы. Перед исследованием различных режимов распространения пламени была проверена устойчивость и сходимость разностной схемы.

Была изучена динамика фронта пламени и показано, что в данной модели возникает критическое значение скорости истечения смеси m_{crit}, выше которого фронт стабилен, а ниже происходит переход в колебательный режим, причем амплитуда колебаний увеличивается по мере уменьшения m (см. рис. 1). Для параметров $Le = 1{,}5, N = 10, \sigma = 0{,}15$ эта величина составляет $m_{crit} = 0{,}79$.

При малых колебаниях фронт остается плоским, что соответствует линейному анализу устойчивости, выполненному в работе [2]. Дальнейшее увеличение амплитуды колебаний при уменьшении m приводит к формированию двумерной структуры фронта пламени (см. рис. 2), которая не описывается линейной теорией, но наблюдается в эксперименте.

Также были обнаружены биения фронта пламени, то есть периодическое изменение амплитуды колебаний (см. рис. 3), в определенном диапазоне значений m, который равен $m = 0{,}779$–$0{,}782$ для значения параметров $Le = 1{,}5, N = 10, \sigma = 0{,}15$.

В настоящее время планируется проверка этих результатов на расчетах в рамках полной модели с распределенной скоростью химической реакции, а также экспериментально.

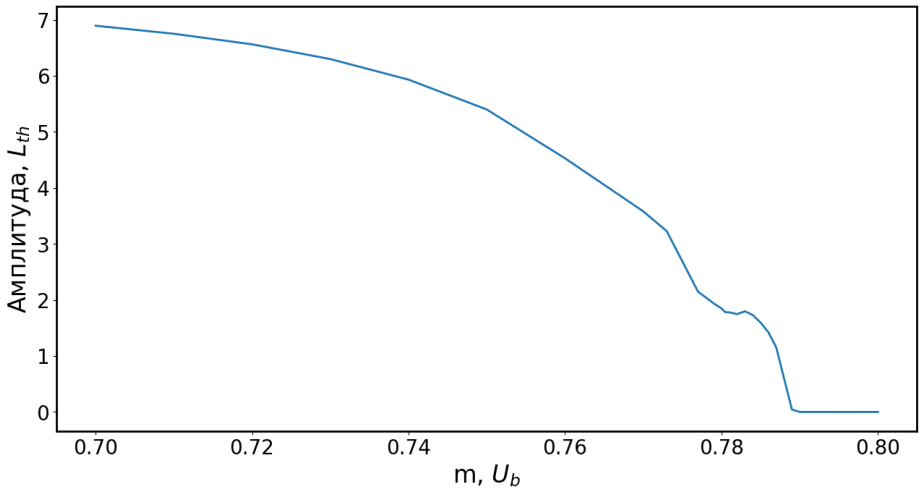


Рис. 1. Зависимость амплитуды колебаний фронта пламени от скорости истечения m при

$$\mathrm{Le} = 1{,}5, \mathrm{N} = 10, \sigma = 0{,}15$$

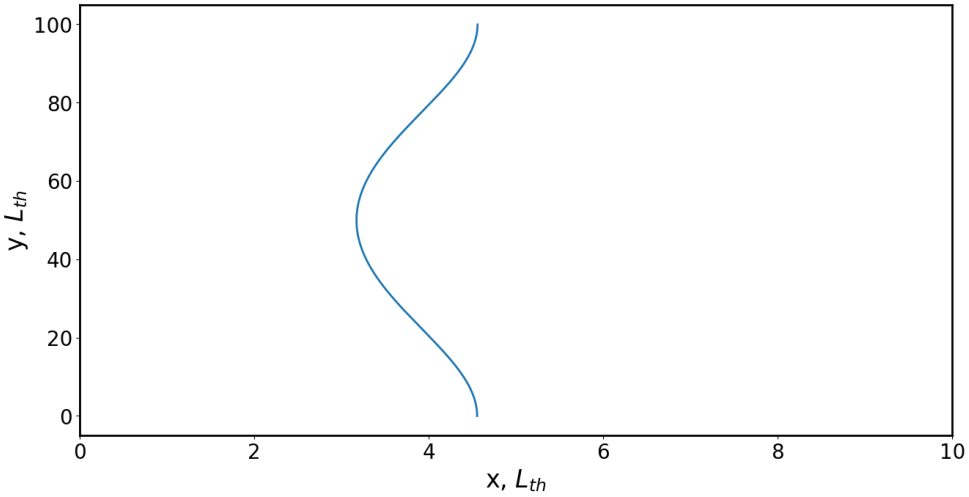


Рис. 2. Форма фронта при $\mathrm{m} < \mathrm{m}_{\mathrm{crit}}, \mathrm{Le} = 1{,}5, \mathrm{N} = 10, \sigma = 0{,}15$

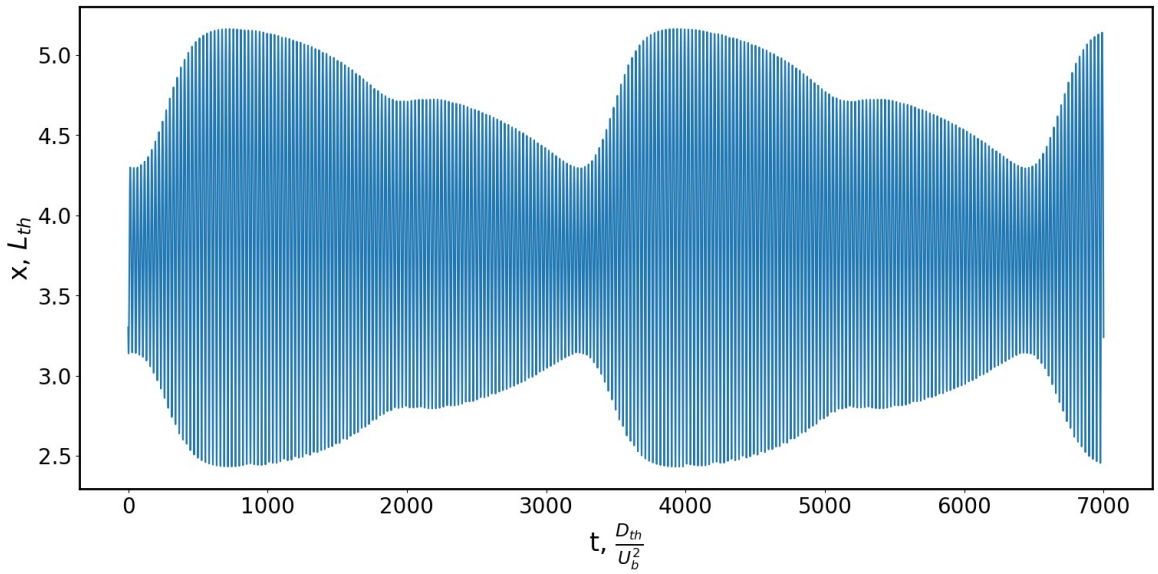


Рис. 3. Биения фронта пламени при $\mathrm{Le} = 1{,}5, \mathrm{N} = 10, \sigma = 0{,}15, \mathrm{m} = 0{,}78$

Литература

1. *Mislavskii V.* [et al.]. Diffusive-thermal pulsations of burner stabilized methane-air flames // Comb. Flame 2021. V. 234: 111638.
2. *Minaev S., Sereshchenko E., Gubernov V.* Evolutionary equations for the disturbed flame stabilised at the flat burner // Combust. Theory Model. 2024. DOI: 10.1080/13647830.2024.2310319.
3. *Nechipurenko S.* [et al.]. Experimental observation of diffusive-thermal oscillations of burner stabilized methane-air flames // Comb. Flame 2020. V. 213. P 202–210.

УДК 535.8

Лазерная система для захвата в оптическую дипольную ловушку холодных атомов рубидия

***Б. Умирбаев*[1], *Г. А. Вишнякова*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Доклад посвящен разработке лазерной системы для захвата в оптическую дипольную ловушку холодных атомов рубидия. Ультрахолодные атомные ансамбли — имеют широчайший спектр применений и при этом зачастую требуют тщательного исследования. Данный проект является одним из шагов к созданию высокочувствительного сенсора электрического поля на основе ультрахолодных ридберговских атомов рубидия, который будет применен для измерения полей, вызванных переходными процессами в атомарно-тонких пленках дихалькогенидов переходных металлов. Понимание этих процессов необходимо для эффективного использования слоистых полупроводников в задачах сенсорики, оптоэлектроники и др. В будущем созданный сенсор может быть использован также для исследования электрической однородности гетероструктур на основе полупроводниковых сверхрешеток, востребованных в фотосенсорике среднего и дальнего ИК-диапазона.

Потенциал ловушки и скорость рассеяния излучения атомом описывается формулами [1]:

$$U_{\mathrm{dip}}(\boldsymbol{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3 \Delta} I(\boldsymbol{r}),$$

$$\Gamma_{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \frac{\Gamma^2}{\Delta^2} I(\boldsymbol{r}),$$

где ω_0 —частота ближайшего перехода, Γ — обратное время жизни возбужденного состояния, I — интенсивность лазерного излучения.

Величина дипольного потенциала имеет обратную зависимость от отстройки и прямую от интенсивности излучения, тогда как скорость рассеяния масштабируется интенсивностью и обратной квадратной зависимостью от отстройки. Поэтому в оптических дипольных ловушках обычно используются большие отстройки и высокие интенсивности, чтобы поддерживать скорость рассеяния как можно более низкой.

В оптической дипольной ловушке атомы могут быть удержаны только в том случае, если их кинетическая энергия меньше потенциальной ямы, создаваемой ловушкой. В связи с этим для эффективной реализации дипольной ловушки производится перегрузка атомов из магнитно-оптической ловушки в дипольную.

Разработана и создана лазерная система на длине волны 1012 нм для захвата атомов в оптическую дипольную ловушку. Система состоит из диодного лазера с внешним резонатором в схеме Литтрова и усилителя на основе оптического волокна, допированного иттербием. Мощность пучка лазера достигает 50 мВт, выходная мощность усилителя — до 2 Вт при токе накачки 12.5 А. Частота лазера стабилизируется по прецизионному измерителю длин волн с помощью встроенного в него блока пропорционально-интегрально-дифференциального контроллера [2]. Точность измерителя длин волн составляет 30 МГц, однако этого вполне достаточно при использовании лазера для формирования потенциала дипольной ловушки.

Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение № 075-15-2023-337 от 20.02.2023 между Министерством науки и высшего образования РФ и МФТИ).

Литература

1. *Grimm R.* [et al.]. Optical Dipole Traps for Neutral Atoms // Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics. 2000. V42. P. 95–70. DOI: 10.1016/s1049-250x(08)60186-x.
2. *Riehle F.* Frequency Standards: Basics and Applications. — Weinheim: Wiley, 2004.

УДК 533.9.082.5

Сравнение результатов измерений электронных параметров плазмы зондами Ленгмюра с изоляторами разных размеров

***А. В. Бернацкий*[2], *И. И. Драганов*[1,2], *В. Н. Очкин*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В физике низкотемпературной плазмы для определения локальных электронных параметров плазмы: функции распределения электронов по энергиям EEDF, средней энергии <*E*> и концентрации электронов N_e, потенциала плазмы U_p, традиционно используют метод зондов Ленгмюра [1, 2]. В многочисленных обзорах и монографиях особое внимание уделяется выбору размера проводящей части зонда. Связано это с необходимым условием соотношения площадей проводящей части зонда и опорного электрода, эффектом «стока» электронов на зонд и влиянием конечного сопротивления плазмы. Однако влияние размера изолятора зонда на результаты измерений обсуждается в литературе лишь качественно. Считается, что размер изолятора должен быть, насколько это позволяют условия, мал, чтобы избежать дополнительных возмущений плазмы. Целью данной работы является изучение влияния размера изолятора зонда Ленгмюра на результаты измерений <*E*>, N_e и U_p. Измерения проводились во всем разрядном промежутке анод-полый катод. Разряд с полым катодом интересен тем, что в области плазмы между полым катодом и анодом концентрация электронов N_e может меняться более чем на порядок [3–5], средняя энергия <*E*> в несколько раз [6], функция распределения электронов по энергии (ФРЭЭ) существенно нелокальна [4, 5, 7]. Таким образом, исследование будет проведено сразу для большого диапазона измеряемых величин. Эксперименты проводились на установке «Течь», подробное описание которой приводится в работе [4]. Использовались изоляторы из стекла диаметрами 230 и 1700 мкм, в которые были вставлены зонды диаметром 60 мкм с длиной проводящей части 2 мм.

Результат измерений U_p, N_e *и* <*E*> продемонстрирован на рис. 1*а–в* соответственно, где X = 0 мм — это катод, X = 30 мм — анод. Видно, что зависимости несколько отличаются друг от друга. При использовании изолятора D = 230 мкм изменение потенциала плазмы в области катод-анод находится в диапазоне 1,3 В, в то время как при D = 1700 мкм — 0,5 В. Измерения N_e зондами с изоляторами разных радиусов дают хорошо согласующиеся между собой результаты в области X > 12 мм. Однако при X < 12 мм различия увеличиваются по мере уменьшения X (приближения к катоду). Аналогичное поведение наблюдается у средней энергии электронов <*E*>.

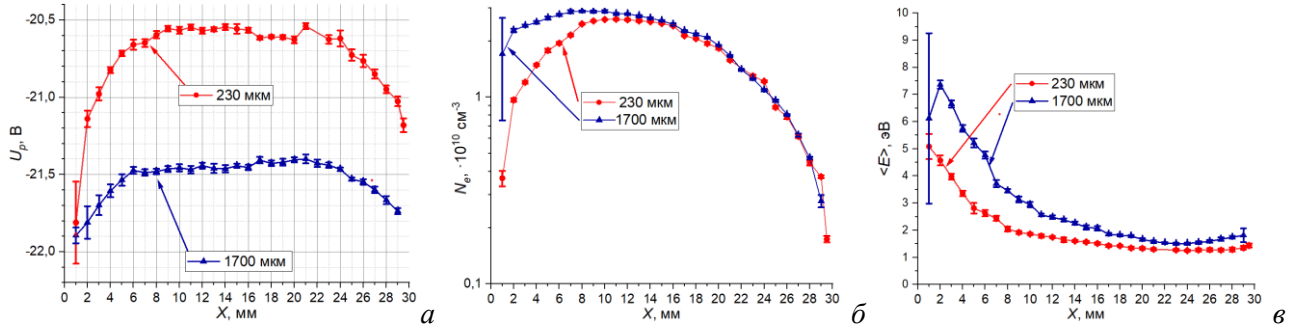


Рис. 1. Распределение потенциала плазмы U_p (*а*), концентрации N_e (*б*) и средней энергии <*E*> (*в*) в области катод-анод. Измерения зондами с разными изоляторами D = 230 мкм и D = 1700 мкм.

Исследовано влияние размера изолятора зонда Ленгмюра на точность измерения потенциала плазмы, средней энергии электронов и их концентрации в тлеющем разряде в гелии, поддерживаемом полым катодом. Показано, что даже использование зондов с диаметром изолятора в 30 раз больше, чем диаметр зонда погрешность в измерении средней энергии электронов не превышает 80%, а концентрации

электронов порядка величины при средних энергиях электронов 5 эВ. Установлено, что влияние размера изолятора зонда на перечисленные характеристики падает, с уменьшением средней энергии электронов, и становится несущественным при средних энергиях меньше 1,5 эВ.

Литература

1. *Mott-Smith H. M., Langmuir I.* The Theory of Collectors in Gaseous Discharges // Physical Review. 1926. V. 28. P. 727–763. DOI: 10.1103/PhysRev.28.727.
2. *Druyvesteyn M. J.* Der Niedervoltbogen // Zeitschrift für Physik. 1930. V. 64. P. 781–798. DOI: 10.1007/BF01773007.
3. *Bernatskiy A. V.* [et al.] Spatial distribution of electron concentration in a DC glow discharge supported by a hollow cathode // PCPP. 2024. V. 44(1). P. 651–666. DOI: 10.1007/s11090-023-10378-z.
4. *Andreev S. N.* [et al.] Local plasma parameters, atom concentrations, and absolute luminescence intensities in the discharge supported by a hollow cathode // Plasma Physics Reports. 2022. V. 48(11). P. 1273–1287. DOI: 10.1134/S1063780X22601043.
5. *Andreev S. N.* [et al.] Study of the effect of the anode on EEDF and the spatial profile of the electron density in a discharge with a hollow cathode in helium // Plasma Physics Reports. 2023. V. 49(8). P. 1031–1037. DOI: 10.1134/S1063780X23600846.
6. *Andreev S. N., Bernatskiy A. V.*, *Ochkin V. N*. Spatial variations of plasma parameters in a hollow cathode discharge // PCPP. 2021. V. 41(2). P. 659–672. DOI: 10.1007/s11090-020-10137-4.
7. *Andreev S. N.* [et al.] Measurements and interpretation of EEDF in a discharge with a hollow cathode in helium: effect of the measuring probe and the anode on the form of the distribution function // PSST. 2022. V. 31(10): 105016. DOI: 10.1088/1361-6595/ac9750.

УДК 662.612.31

Скорость и структура пламен с цепными реакциями

***К. Д. Хвосточенко*[1], *Е. В. Серещенко*[2], *В. В. Губернов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

В данной работе рассматривается одномерная диффузионно-тепловая модель горения с двухстадийным цепным механизмом химическими реакции. Эта модель качественно описывает поведение богатых водород-воздушных пламен [1]. В отличие от классической одностадийной модели, эта модель позволяет учитывать более тонкие процессы образования радикалов, что существенно улучшает описание динамики фронтов пламени.

Безразмерные уравнения, описывающие динамику распространения, выглядят следующим образом [2]:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + c\frac{\partial\theta}{\partial x} + (1-\sigma)\big(qRX + K_1(1-q)\big),$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = L_F^{-1}\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + c\frac{\partial Y}{\partial x} - K_1,$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = L_X^{-1}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + c\frac{\partial X}{\partial x} + K_1 - RX,$$

$$K_1 = \beta^2 XY e^{\beta(1-1/\theta)}.$$

Здесь θ — температура смеси, X — концентрация радикалов, а Y — концентрация топлива. Остальные параметры системы, описанные ниже, мы считаем постоянными в процессе реакции.

Данная модель имеет множество параметров, например: числа Льюиса для топлива и радикалов (L_F, L_X), скорость реакции рекомбинации (R), число Зельдовича для реакции разветвления цепи (β) — которые по-разному влияют на динамику волны горения. Целью данного исследования являлось изучение поведения решения, при изменении различных параметров. Анализ полученных результатов позволяет понять, какие параметры существенно влияют на устойчивость пламени, скорость его распространения (c), а также другие его характеристики. Система решается численно с использованием неявной шеститочечной разностной схемы, что дает возможность менять шаг интегрирования по пространству и по времени в достаточно широких диапазонах для более быстрого счета.

Помимо численных расчетов, в работе проведены аналитические выкладки в пределе высокой энергии активации и малого L_X, которые позволили упростить систему основных уравнений, а именно: заменить K_1 на $Q_f\delta(x)$, где $Q_f = \frac{\sqrt{2L_f X_0}}{1-\sigma} e^{\frac{\beta}{2}(1-1/\theta_0)}$ и считать концентрацию радикалов постоянной в зоне реакции разветвления и равной X_0. Эти условия позволяют получить трансцендентное уравнение, связывающее X_0 и остальные параметры системы, что дает возможность аналитически получить зависимость скорости фронта и X_0 от разных параметров системы. На рис. 1 представлен пример зависимости скорости распространения фронта пламени от скорости реакции рекомбинации при разных числах Льюиса для топлива.

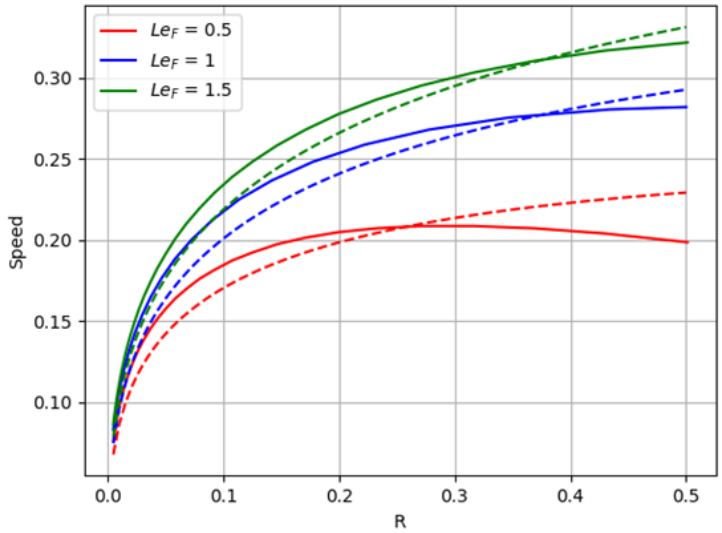


Рис. 1. Зависимость скорости фронта пламени от скорости рекомбинации (R) в интервале от 0.005 до 0.5 для разных чисел Льюиса для топлива (0.5, 1, 1.5). Сплошной линией нарисованы результаты численного моделирования, а пунктирной — результаты аналитических вычислений

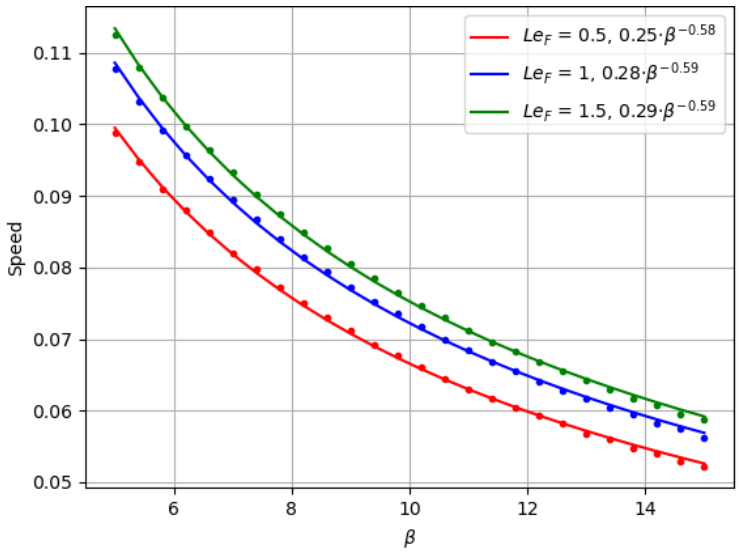


Рис. 2. Зависимость скорости фронта пламени от скорости числа Зельдовича (β) в интервале от 5 до 15 для разных чисел Льюиса для топлива (0.5, 1, 1.5). Точками указаны результаты численных расчетов, а сплошной линией изображена аппроксимация степенной функцией

С помощью обоих подходов была детально исследована зависимость скорости и структуры пламени от параметров системы. Показано, что результаты численного анализа качественно согласуются с аналитическими предсказаниями.

Также было установлено, что в отличие от одностадийных волн горения, безразмерная скорость пламени в данной модели зависит от числа Зельдовича степенным образом с показателем близким к 0.6 (т.е. скорость пропорциональна $z^{-0.6}$), в то время как в одностадийной модели безразмерная скорость константа. На рис. 2 приведен график зависимость скорости распространения фронта пламени от числа Зельдовича при разных числах Льюиса для топлива. Точки на графике — результаты численных расчетов, а сплошные линии — результаты аппроксимации степенной функцией.

В дальнейшем мы планируем применить оба подхода для описания свойств пламен богатых водород-воздушных смесей в различных конфигурациях. Предложенный аналитический подход позволит нам давать качественные оценки характеристик данных пламен.

Литература

1. *Зельдович Я. Б.* [и др.]. Сложные и цепные реакции в пламенах // Математическая теория горения и взрыва — М.: Наука, 1980. С. 290–328.
2. *Gubernov V. V., Sidhu H. S., Mercer G. N.* Combustion waves in a model with chain branching reaction and their stability // Combustion Theory and Modelling 2008. V. 12: 3. P. 407–431.

УДК 524.882, 524.834, 531.266.3, 531.51

Обобщенный мост Эйнштейна-Розена внутри черных дыр

***К. Э. Прокопьев*[1,2], *В. И. Докучаев*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Впервые «кротовая нора» — тоннель в пространстве времени — обсуждалась еще в 1916 г. в работах Л. Фламма [1] вскоре после открытия метрики Шварцшильда. Позднее кротовые норы были рассмотрены в работе А. Эйнштейна и Н. Розена, опубликованной в 1935 г. [2], откуда и возникло понятие мост Эйнштейна–Розена. В настоящее время обсуждаются различные возможности существования таких мостов как в общей теории относительности Эйнштейна, так и в ее многочисленных модификациях.

Первоначальная идея бесконечного ряда мостов между вселенными в метрике Керра принадлежит Бойеру и Линдквисту [3]. В работах [4–6] обсуждаются физические препятствия для существования мостов Эйнштейна–Розена между вселенными, связанные с различными типами нестабильностей, включая квантовые.

В настоящей работе мы обобщаем понятие моста Эйнштейна–Розена, определяя его как пространственно-подобную связь между двумя вселенными с асимптотически минковскими областями пространства-времени в пределе больших расстояний от горизонтов [7]. Соответствующие свойства симметрии и асимметрии обобщенного моста Эйнштейна-Розена рассматриваются на примерах метрик Рейсснера-Нордстрема и Керра (рис. 1, 2). На примере диаграмм Картера–Пенроуза демонстрируются свойства симметрии и асимметрии при движении пробного тела, например, космического корабля, сквозь множество различных вселенных внутри черной дыры.

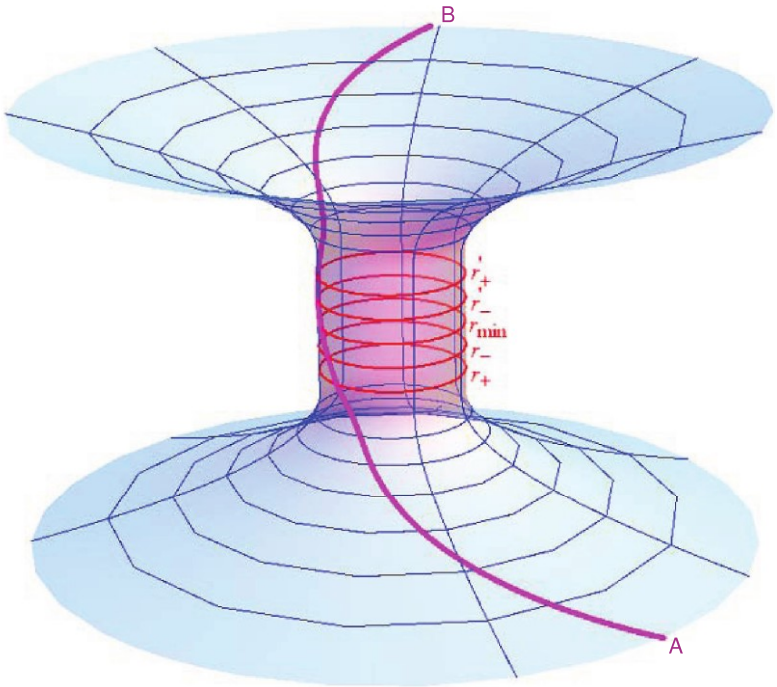


Рис. 1. Схема пространственного искажения для путешествия сквозь черную дыру с использованием моста Эйнштейна–Розена

Важно отметить, что проходимый (хотя и только в одну сторону) мост Эйнштейна–Розена существует только в случае или вращающихся черных дыр Керра ($a \neq 0$), или электрически заряженных черных дыр Рейсснера–Нордстрема ($q \neq 0$). Внутри черной дыры Шварцшильда он вовсе отсутствует.

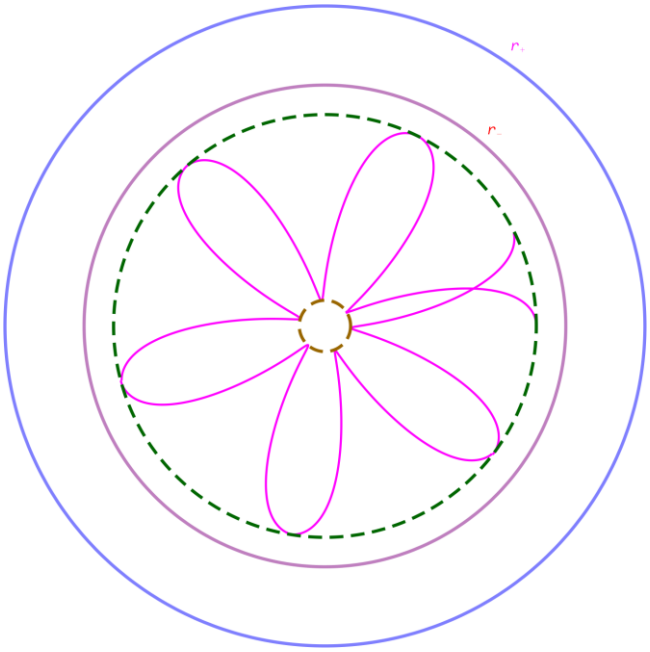


Рис. 2. Траектория периодического орбитального движения пробного тела (например, космического корабля) внутри черной дыры Рейсснера–Нордстрема

Литература

1. *Flamm L.* Beiträge zur Einsteinschen gravitationstheorie // Physikalische Zeitschrift. 1916. T. 17. P. 448–454.
2. *Einstein A., Rosen N.* The particle problem in the general theory of relativity // Physical Review. 1935. V. 48(1). P. 73–77.
3. *Boyer R. H., Lindquist R. W.* Maximal analytic extension of the Kerr metric // Journal of mathematical physics. 1967. V. 8(2). P. 265–281.
4. *Gürsel Y.* [et al.] Evolution of scalar perturbations near the Cauchy horizon of a charged black hole // Physical Review D. 1979. V. 19(2). P. 413–420.
5. *Simpson M., Penrose R.* Internal instability in a Reissner-Nordström black hole // International Journal of Theoretical Physics. 1973. V. 7. P. 183–197.
6. *DeMott R., Major S., Flournoy A.* On the stability of a wormhole in the maximally-extended Reissner–Nordström solution // Classical and Quantum Gravity. 2022. V. 39(19): 195015.
7. *Dokuchaev V. I., Prokopev K. E.* Generalized Einstein-Rosen bridge inside black holes // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2312.15870.

УДК 52-14, 52-77, 524.7-77

Возможные ограничения на скорости распространения источников нейтрино в джетах активных ядер галактик

***Л. А. Солнышко*[1], *К. Д. Хвосточенко*[1], *Е. Е. Нохрина*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Релятивистские струйные выбросы из активных ядер галактик зарождаются в окрестностях вращающихся сверхмассивных черных дыр, аккрецирующих вещество из окружающей среды. Последние данные [1, 2] указывают на возможную ассоциацию источников нейтрино с яркими блазарами. Есть указания на задержки вспышек в радиодиапазоне на разных частотах по отношению к нейтрино.

Цель исследования заключалась в ограничении области рождения нейтрино в джетах блазаров. Рассматривались активные ядра галактик — возможные кандидаты в источники нейтрино. Мы использовали данные по задержкам времени прихода нейтрино и вспышек в радиодиапазоне [1]. Применение метода

видимого сдвига ядра позволило сравнить ожидаемые задержки во времени и скорости распространения плазмы.

Излучение джетов активных ядер галактик в радиодиапазоне хорошо объясняется синхротронным излучением с самопоглощением электрон-позитронной плазмы. Из-за изменения концентрации плазмы и величины магнитного поля вдоль джета наблюдается эффект видимого сдвига ядра — самой яркой стационарной компоненты выброса. Таким образом, видимое основание джета наблюдается на разных расстояниях от истинного для разных частот. Измерение этого сдвига позволяет оценить параметры джета [3].

Были рассмотрены активные ядра галактик, отождествляющиеся с источниками нейтрино. Среди них были отобраны те, для которых известны видимые сдвиг ядра Δr [4] и фактор Лоренца Γ [5]. Также мы использовали данные РАТАН-600 (sao.ru). По видимому сдвигу ядра мы оценили задержку Δt_{22-11} между вспышками на частотах 22 и 11 ГГц. Также мы оценили фактор Лоренца Γ_{flare} распространения возмущения для средней наблюдаемой задержки в 0,25 года [1].

Таблица 1. Объекты, отождествленные с источниками нейтрино

Объект	Δr (mas)	Γ	Δt_{22-11} (year)	Γ_{flare}
2145+067	0,008	7,794	0,104	2,608
0333+321	0,279	14,883	0,927	12,123
1253-055	0,048	20,801	0,052	4,809
1730-130	0,174	27,368	0,108	9,498
1502+106	0,052	18,724	0,164	3,257

Мы показали, что результаты по задержкам вспышек [1] указывают на скорость распространения источника нейтрино меньшую, чем наблюдаемые максимальные скорости плазмы в джете. Скорость у источника 1502+106, оцененная по запаздыванию на 15 ГГц [6] с высокой точностью совпала с нашими результатами по запаздываниям на частотах 22 и 11 ГГц.

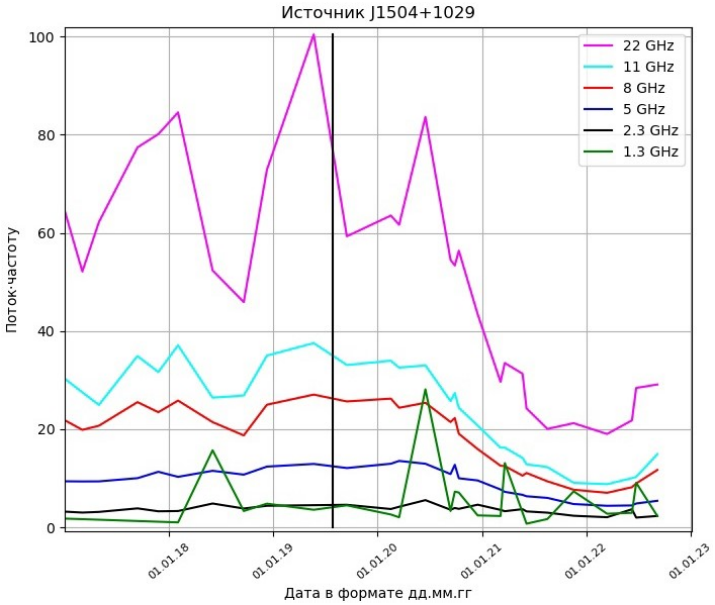


Рис. 1. Вспышки источника J1504+1029. Данные РАТАН-600

Литература

1. *Plavin A. V.* [et al.]. Observational evidence for the origin of high-energy neutrinos in parsec-scale nuclei of radio-bright active galaxies // ApJ.2020. V. 894(2): 101.
2. *Plavin A. V.* [et al.]. Directional association of TeV to PeV astrophysical neutrinos with radio blazars // ApJ.2021. V. 908(2): 157.
3. *Lobanov A*. Spectral distributions in compact radio sources I. Imaging with VLBI data // Astronomy and Astrophysics Supplement. 1998. V. 132. P. 261–273
4. *Pushkarev A*. [et al.]. MOJAVE: Monitoring of Jets in Active Galactic Nuclei with VLBA Experiments. IX. Nuclear opacity // A&A. 2012. V. 545: A113.
5. *Pushkarev A.* [et al.]. MOJAVE-XIV. Shapes and opening angles of AGN jets // MNRAS. 2017. V. 468(4). P. 4992–5003.
6. *Kiehlmann S.* [et al.]. Neutrino candidate source FSRQ PKS 1502+106 at highest flux density at 15 GHz // Astronomer's Telegram. 2019: 12996.

УДК 519.837

Игра Изинга с дискретным бинарным беспорядком

***А. В. Леонидов*[1,2], *М. С. Прусаков*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Игры с зашумленным бинарным выбором представляет собой интересный объект исследования из-за возникающих в них аналогий со статистической физикой спиновых систем. Одним из примеров таких игр является игра Изинга на полном графе [1]. В представленной работе рассматривается система со случайным распределением знаков взаимодействия между агентами в игре Изинга, которое приводит к конкуренции между ферро- и антиферромагнитными связями и, как следствие, фрустрации. Это в свою очередь приводит к появлению ранее не изученной фазы спинового стекла в поведении агентов, то есть фазы, в которой агенты замерзают в локальных максимумах функции полезности. Рассматривается также несимметричный случай задания матрицы взаимодействия, который не имеет физического аналога, но интересен с точки зрения теории игр. Показывается, что несимметричное взаимодействие снижает критическую температуру перехода в фазу спинового стекла и может привести к ее полному исчезновению при достаточно высокой ассиметрии.

Динамическая игра Изинга, рассматриваемая в настоящей работе, формулируется следующим образом. Рассматривается взаимодействие N агентов, находящихся в узлах полного графа. Каждый агент имеет в своем распоряжении две стратегии: $s_i = \pm 1$. Главной особенностью системы является матрица взаимодействия J, элементы которой задаются распределением:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1-p)p\delta(J_{ij} + J). \quad (1)$$

Здесь J — положительная константа, задающая силу взаимодействия между двумя агентами, а p и $1-p$ — вероятности появления положительной или отрицательной связи соответственно. Игра развивается в дискретном времени. В каждый момент состояние системы задается набором стратегий $(s_1(t), s_2(t), \dots, s_N(t))$. Эволюция системы происходит в результате пересмотра стратегий агентами $s_i(t-1) \to s_i(t)$, при этом в каждый момент времени шанс пересмотреть стратегию выпадает только одному случайно выбранному агенту. Пересмотр стратегии осуществляется после учета агентами своей полезности, которая определяется следующим образом:

$$U(s_i) = \frac{1}{N}\sum_{j \neq i}^{N} J_{ij} s_i s_j + \epsilon_{s_i} \quad (2)$$

Здесь ϵ_{s_i} — стохастическая компонента, зависящая от выбранной агентом стратегии. В работе предполагается, что этот случайный вклад определяется распределением Гумбеля с параметрами $(0, \beta)$, где β — обратная температура.

Для получения фазовой диаграммы в координатах $T(p)$ был использован метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. Были проведены симуляции игр для разных точек этой плоскости, в которых искались значения двух параметров порядка: средней стратегии m и параметра Эдвардса–Андерсона q, задаваемые следующими формулами:

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle, q = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle^2. \quad (3)$$

Параметр m — аналог намагниченности — характеризует степень согласованности выбора агентов: он равен нулю в парамагнитной фазе, которая также называется фазой слабого взаимодействия и отличен от нуля в ферромагнитной фазе — фазе сильного взаимодействия. Параметр q характеризует степень замороженности системы в локальных максимумуах функции полезности: он достигает максимального значения в фазе спинового стекла и стремится к нулю в парамагнитной фазе [2]. Получившаяся фазовая диаграмма изображена на рис. 1.

Также в работе был рассмотрен случай несимметричной матрицы взаимодействия. Для этого в изначально симметричную матрицу J вводится ассиметрия, то есть элементы, для которых выполняется

$J_{ij} \neq J_{ji}$. При этом вероятность появления положительной связи остается равной p. Для количественной оценки степени несимметричности матрицы определим параметр γ:

$$\gamma = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} |A - B^T|_{ij} . \quad (4)$$

Здесь N — число агентов, а A и B — верхнетреугольная и нижнетреугольная подматрицы матрицы взаимодействия J. Поэлементаная сумма в этом параметре дает нам удвоенное количество несимметричных пар в матрице, а нормировочный множитель $2/N(N-1)$ позволяет рассматривать γ на отрезке $[0;\ 1]$, где $\gamma = 0$ соответствует случаю абсолютно симметричной матрицы, то есть случаю, рассмотренному ранее, а $\gamma = 1$ — случаю абсолютно антисимметричного взаимодействия.

Было рассмотрено поведение нашей системы в фазе спинового стекла при $p = 0{,}5$ при постепенном увеличении параметра γ, а именно анализировалось, как меняется критическая температура перехода из фазы парамагнитного поведения в спиновое стекло в зависимости от величины γ. Из аппроксимации данных было получено, что при $\gamma \geq 0{,}5$ фаза спинового стекла исчезает вовсе, а до этого при γ лежащем в пределах $(0; 0{,}5)$ критическая температура перехода линейно убывает. Получившийся график критической температуры T_c в зависимости от параметра ассиметрии γ изображен на рис. 2.

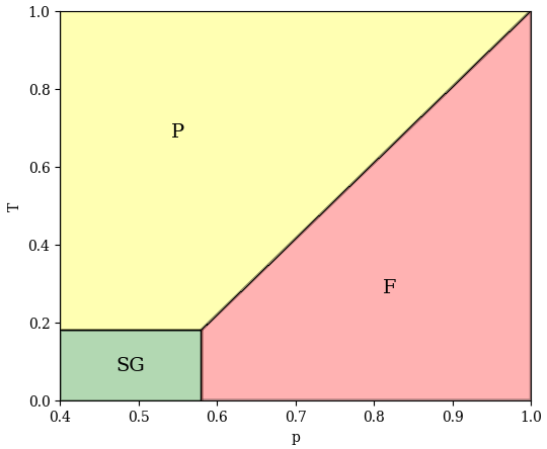


Рис. 1. Фазовая диаграмма игры на плоскости (p, T). Область F, выделенная красным цветом, соответствует ферромагнитному поведению агентов, область P, выделенная желтым, — парамагнитному поведению, а зеленая область SG отмечает все точки (p, T) в которых система ведет себя как спиновое стекло

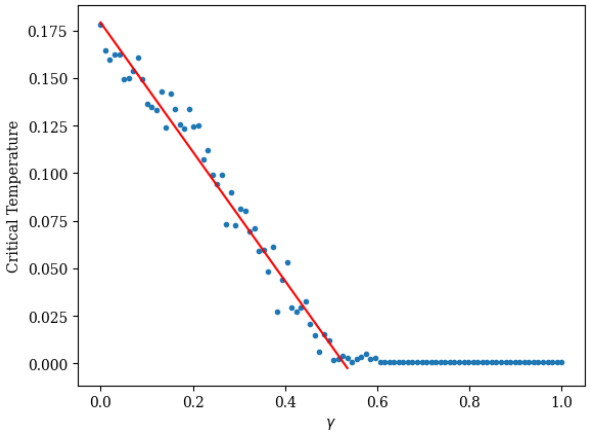


Рис. 2. Зависимость критической температуры перехода парамагнетик — спиновое стекло от параметра ассиметрии взаимодействия

Литература

1. *Leonidov A., Savvateev A., Semenov A.* Ising Game on Graphs // Chaos, Solitons Fractals. 2024. V. 180(C): 114540. DOI: 10.1016/j.chaos.2024.114540.
2. *Edwards S. F., Anderson P. W.* Theory of spin glasses // J. Phys. F: Met. Phys. 1975. V. 5. P. 965–974. DOI: 10.1088/0305-4608/5/5/017.
3. *Nishimori H.*, Statistical Physics of Spin Glasses and Information. — Oxford: Clarendon Press, 2001.

УДК 535:530.182, 535-14

Эффективность генерации терагерцового излучения от энергии лазерного импульса в процессе одноцветной филаментации

***М. В. Левусь*[1,2], *Г. Э. Ризаев*[2], *Д. В. Пушкарев*[2], *Т. А. Дик*[3], *Л. В. Селезнев*[2]**

[1]Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одним из источников терагерцового излучения являются плазменные каналы, образующиеся при одноцветной филаментации. Спектральные характеристики такого излучения неоднородны в пространстве и зависят от угла между оптической осью, вдоль которой распространяется лазерный импульс, и прямой, направленной на детектор. Согласно ранее опубликованным работам, с уменьшением частоты угол распространения максимума интенсивности терагерцового излучения увеличивается [1]. Кроме того, такие частотно-угловые распределения могут быть неосесимметричными [2]. Целью настоящей работы является экспериментальное исследование зависимости эффективности генерации терагерцового излучения от энергии лазерного импульса.

Для получения плазменных каналов в эксперименте использовался фемтосекундный лазер с центральной длиной волны 744 нм и длительностью 90 фс. Лазерное излучение фокусировалось сферическим зеркалом. С помощью болометра осуществлялась регистрация терагерцового излучения. Для выделения отдельных спектральных частот перед окном детектора помещались узкополосные терагерцовые фильтры. Варьирование числовой апертуры происходило благодаря телескопированию пучка и использованию сферических зеркал с разными фокусными расстояниями. Энергия лазерного импульса изменялась с помощью дифракционного ослабителя. Методика эксперимента основана на получении полных двумерных угловых распределений терагерцового излучения при различных параметрах лазерного импульса [3]. Энергия терагерцового излучения рассчитывалась суммированием элементарных сигналов диаграммы направленности.

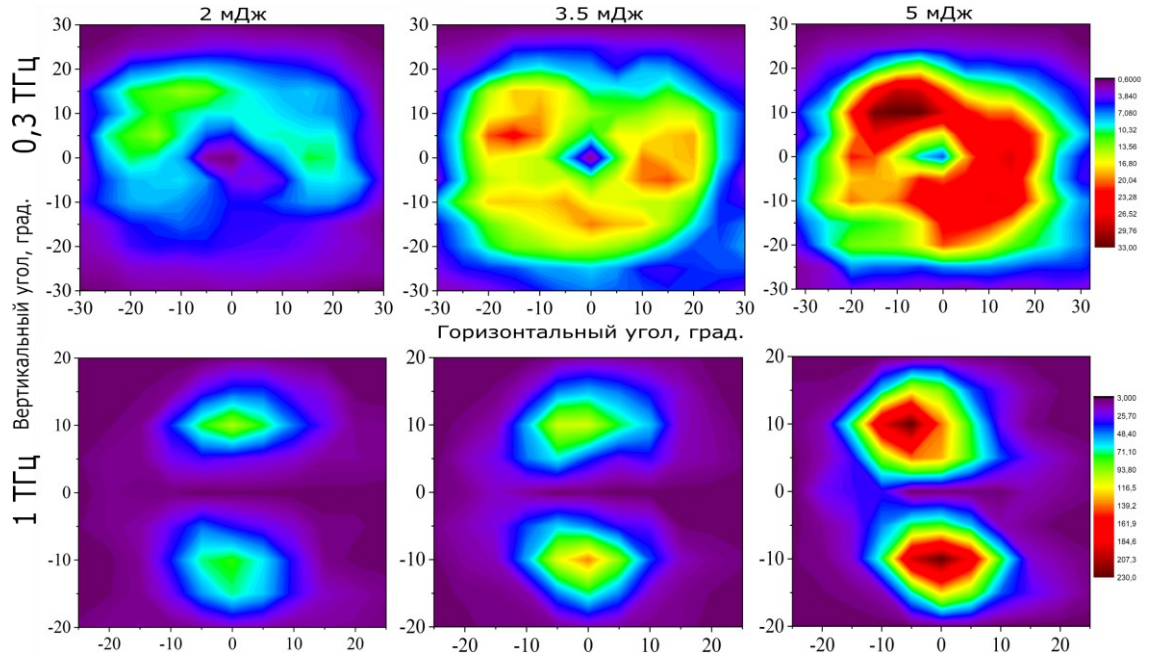


Рис. 1. Двумерные угловые распределения терагерцового излучения при фиксированной числовой апертуре NA = 0.024 на двух частотах 0.3 и 1 ТГц в зависимости от энергии лазерного импульса

На рис. 1 представлена эволюция диаграмм направленностей при увеличении энергии лазерного импульса, числовая апертура пучка оставалась неизменной. Пространственное распределение на частоте 0.3 ТГц имеет кольцеобразную структуру. Диаграммы направленности на частоте 1 ТГц неосесимметричные, имеют два максимума, что подробнее проанализировано в работе [4]. Форма пространственных распределений для каждой частоты практически не изменяется в зависимости от энергии лазерного импульса.

На рис. 2 представлены зависимости энергии терагерцового излучения от энергии лазерного импульса: при фиксированной числовой апертуре пучка на двух частотах и на одной частоте при разных

числовых апертурах пучка. Каждая зависимость имеет характер близкий к линейному в представленном диапазоне энергий.

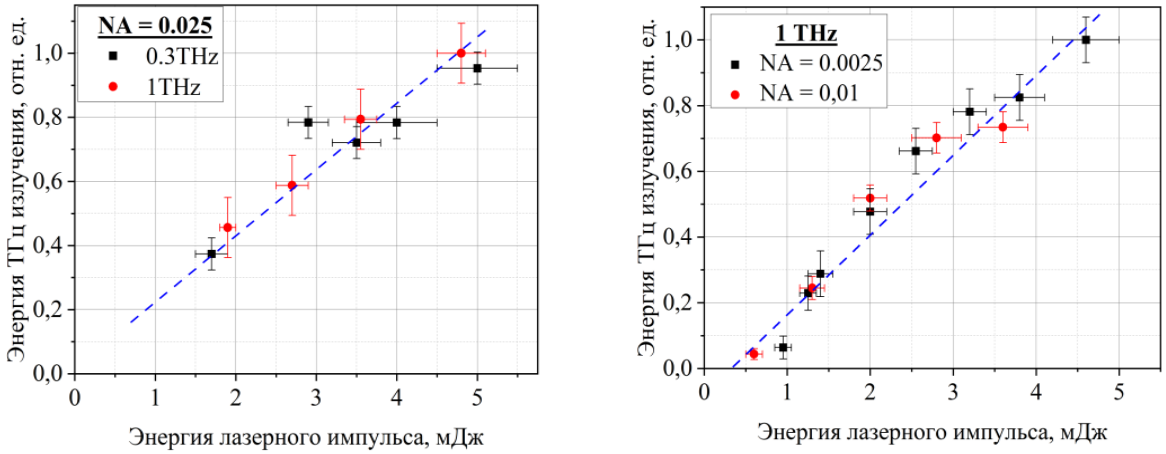


Рис. 2. Зависимость энергии терагерцового излучения от энергии лазерного импульса при различных условиях эксперимента

Таким образом, экспериментально исследована эффективность генерации терагерцового излучения при различных фокусировках и энергиях лазерного импульса. Пространственная структура такого излучения слабо зависит от энергии лазерного импульса для всего диапазона рассмотренных частот. Выход терагерцового излучения из плазмы одноцветного филамента линейно зависит от энергии лазерного импульса при различных числовых апертурах пучка.

Литература

1. *D'Amico C.* [et al.]. Conical forward THz emission from femtosecond-laser-beam filamentation in air // Physical review letters. 2007. V. 98(23): 235002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.235002.
2. *Akhmedzhanov R. A.* [et al.]. Plasma mechanisms of pulsed terahertz radiation generation // Radiophysics and Quantum Electronics. 2009. V. 52: 482. DOI: 10.1007/s11141-009-9155-6.
3. *Rizaev G., Pushkarev D., Seleznev L.* Spectrum of terahertz emission from single-color filament plasma under different laser beam focusing // Photonics. 2023. V. 10(10): 1161. DOI: 10.3390/photonics10101161.
4. *Nikolaeva I. A.* [et al.]. Terahertz beam with radial or orthogonal to laser polarization from a single-color femtosecond filament // Optics Express. 2023. V. 31(25):41406. DOI: 10.1364/OE.502931.

УДК 535.58

Описание компонент Давыдовского расщепления в спектрах поглощения поляризованного света трубчатыми молекулярными агрегатами

***С. С. Моритака*[1,2]**

[1]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Прогресс в фундаментальной и прикладной фотонике и оптоэлектронике сопровождается потребностью в создании и исследовании новых материалов с уникальными оптическими свойствами. Одним из перспективных классов наноструктурированных материалов являются упорядоченные молекулярные агрегаты органических красителей. Такие самосборные супрамолекулярные комплексы обладают рядом уникальных свойств, привлекательных для широкого круга приложений (см. обзоры [1, 2]). В частности, молекулярные J-агрегаты демонстрируют рекордно узкие ширины спектральных полос, высокие значения силы осциллятора и громадную нелинейную восприимчивость. К настоящему времени подробно исследован целый ряд молекулярных агрегатов, обладающих достаточно простой линейной или планарной структурой, например, агрегаты цианиновых красителей TTBC и THIATS [3]. В последнюю декаду наблюдается существенный рост интереса исследователей к агрегатам, обладающих более сложной геометрической структурой [4]. Благодаря структурному усложнению такие системы обладают новыми оптическими свойствами.

На сегодняшний день проводятся активные экспериментальные [5, 6] и теоретические [7, 8] исследования агрегатов, обладающие структурой полых цилиндрических трубок. Интерес к таким системам в значительной мере вызван их важностью в природном процессе фотосинтеза, где они работают в качестве светособирающих антенн [9]. Трубчатая структура агрегата способствует высокой эффективности как поглощения световой энергии, так и энергетического переноса к центрам реакции. Трубчатые агрегаты использовались также в составе ряда искусственных гибридных наносистем, например, в соединении с плазмонными наночастицами [10] и с квантовыми точками [11]. В работах [10, 11] была экспериментально продемонстрирована возможность регулирования характера оптических спектров и энергетического переноса, что достигалось с помощью изменения параметров системы. Следует также отметить, что разработаны относительно простые методы изготовления трубчатых агрегатов с различной структурой на основе одного и того же красителя [12]. Указанные факты демонстрируют широкие перспективы создания материалов с заданными оптическими свойствами для приложений фотоники.

В связи с привлекательностью трубчатых агрегатов для создания фотонных материалов с заданными свойствами важно установление взаимосвязи их результирующих оптических спектров со структурой молекулярной упаковки. Ранее отдельные особенности экспериментальных спектров были объяснены теоретически с использованием экситонных моделей [7] и квантовохимических численных расчетов [8]. При этом зависимости спектральных и поляризационных свойств трубчатых агрегатов от параметров их геометрической структуры были установлены лишь в рамках экситонной модели для нанотрубок наиболее простого вида, которые можно представить как результат сворачивания двумерного листа с одной молекулой в ячейке [13]. Самосогласованные аналитические результаты для трубчатых агрегатов более сложной структуры на настоящий момент отсутствуют. В то же время экспериментально активно исследуются агрегаты, характер оптических спектров которых не может быть объяснен в рамках существующей экситонной модели, такие как агрегаты амфифильного красителя C8S3 [10]. Эти агрегаты обладают дополнительными спектральными пиками в спектрах поглощения и линейного дихроизма, которые предлагалось описывать [10] как компоненты Давыдовского расщепления, обусловленные наличием в элементарной ячейке стенки трубчатого агрегата двух молекул мономера красителя с различной ориентацией. Цель данной работы состоит в развитии экситонной модели трубчатого агрегата для аналитического описания интенсивности и поляризации новых компонент Давыдовского расщепления, вызванного усложнением структуры трубчатого агрегата, в зависимости от его геометрических параметров.

В работе проведено теоретическое исследование спектров поглощения поляризованного света трубчатыми агрегатами с двумя молекулами в элементарной ячейке однослойной стенки. Предложенная в работе теория строилась на основе базовых квантовомеханических выражений для взаимодействия молекулярных систем с полем фотонов и известной теории молекулярных экситонов Давыдова. В рамках решаемой задачи ориентация оси трубки предполагалась заданной в плоскости, перпендикулярной волновому вектору падающего света, при этом каждая трубка имеет случайный азимутальный поворот вокруг собственной оси. Такая постановка соответствует распространенным методам изготовления образцов ориентированных молекулярных агрегатов для исследования поляризационных спектров [6]. В таком случае оказывается возможным пренебречь эффектами запаздывания света. Ввиду значительной продольной протяженности агрегата на систему были наложены периодические граничные условия.

В результате проведенного рассмотрения были получены аналитические формулы для силы линии индивидуальных экситонных переходов при поглощении фотонов с частотой ω и поляризацией α. Определена зависимость поляризации соответствующих спектральных компонент от угла φ, задающего относительный азимутальный поворот дипольных моментов перехода двух молекул в ячейке, и углов θ_1 и θ_2, описывающих их отклонение от направления оси агрегата. Изменение указанных углов проявляется как эффективное перераспределение силы линии между спектральными компонентами Давыдовского расщепления. Отметим, что когда ориентации двух молекул в ячейке совпадают, т.е. когда $\varphi = 0$ и $\theta_1 = \theta_2$, то исследуемая система эффективно переходит в традиционный трубчатый агрегат с одной молекулой в ячейке. Развитая в настоящей работе модель содержит выражения для описания традиционных трубчатых агрегатов в качестве частного случая. На рис. 1 приведены результаты расчетов спектров модельных трубчатых агрегатов, выполненных на основе полученных аналитических выражений. Видно, что поведение компонент Давыдовского расщепления заметно различается в зависимости от значений углов. Параметры модели соответствуют типичным значениям для трубчатых агрегатов цианиновых красителей.

Полученные результаты могут представлять интерес при разработке и исследовании новых материалов с заданными оптическими свойствами, содержащих трубчатые агрегаты красителей, для использования в поляризационно-чувствительных фотонных устройствах. В частности, аналитические выражения можно использовать для определения молекулярной конфигурации нулевого приближения в методе многомасштабного численного моделирования [8].

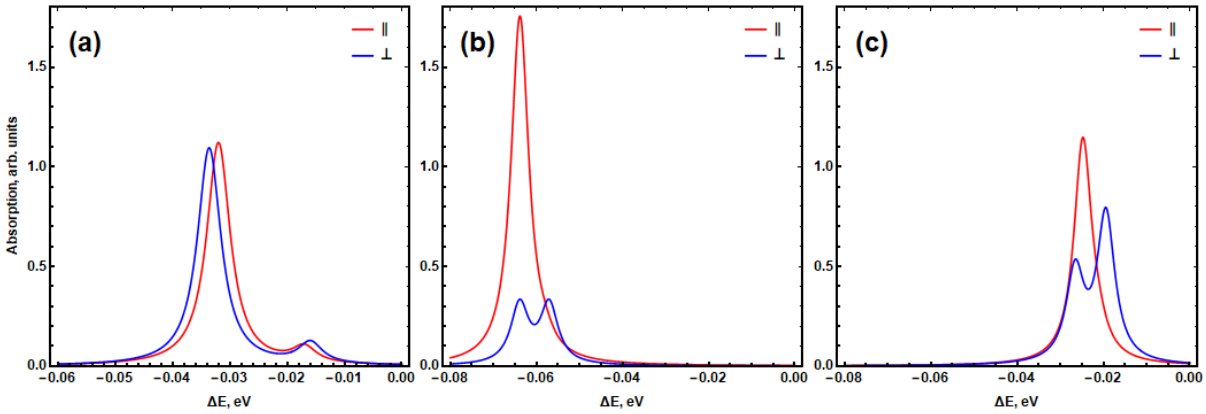


Рис. 1. Расчетные спектры поглощения поляризованного света модельными трубчатыми агрегатами. Красные кривые — поляризация параллельна оси агрегата, синие кривые — перпендикулярна оси. На оси абсцисс отложена величина отстройки от предполагаемой энергии перехода в молекуле мономера. Выбранные значения углов в модели: (a) $\theta_1 = 30°, \theta_2 = 60°, \varphi = 0$; (b) $\theta_1 = 45°, \theta_2 = 0, \varphi = 90°$; (c) $\theta_1 = 30°, \theta_2 = 60°, \varphi = 180°$

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант No. 19-79-30086).

Литература

1. *Hestand N. J., Spano F. C.* Expanded theory of H- and J-molecular aggregates: the effects of vibronic coupling and intermolecular charge transfer // Chem. Rev. 2018. V. 118(15). P. 7069–7163.
2. *Bricks J. L.* [et al.]. Fluorescent J-aggregates of cyanine dyes: basic research and applications review // Methods Appl. Flouresc. 2018. V. 6(1): 012001.
3. *Würthner F., Kaiser T. E., Saha-Möller C. R.* J-Aggregates: From Serendipitous Discovery to Supramolecular Engineering of Functional Dye Materials // Angew. Chem. Int. Ed. 2011. V. 50(15). P. 3376–3410.
4. *Ma S.* [et al.]. Organic molecular aggregates: From aggregation structure to emission property // Aggregate. 2021. V. 2(4): e96.
5. *Bailey A. D.* [et al.]. Exploring the design of superradiant J-aggregates from amphiphilic monomer units // Nanoscale. 2023. V. 15(8). P. 3841–3849.
6. *Clark K. A., Cone C. W., Vanden Bout D. A.* Quantifying the Polarization of Exciton Transitions in Double-Walled Nanotubular J-Aggregates // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 117(50). P. 26473–26481.
7. *Chuang C.* [et al]. Quantum Diffusion on Molecular Tubes: Universal Scaling of the 1D to 2D Transition // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 116(19): 196803.
8. *Bondarenko A. S.* [et al.]. Multiscale modeling of molecular structure and optical properties of complex supramolecular aggregates // Chem. Science. 2020. V. 11(42). P. 11514–11524.
9. *Otsuki J.* Supramolecular approach towards light-harvestingmaterials based on porphyrins and chlorophylls // J. Mater. Chem. A. 2018. V. 6(16). P. 6710–6753.
10. *Eisele D.* [et al.]. Utilizing redox-chemistry to elucidate the nature of exciton transitions in supramolecular dye nanotubes // Nature Chem. 2012. V. 4(8). P. 655–662.
11. *Qiao Y.* [et al.]. Nanotubular J-Aggregates and Quantum Dots Coupled for Efficient Resonance Excitation Energy Transfer // ACS Nano. 2015. V. 9(2). P. 1552–1560.
12. *Schade B.* [et al.]. Stereochemistry-Controlled Supramolecular Architectures of New Tetrahydroxy-Functionalised Amphiphilic Carbocyanine Dyes // Chem. Eur. J. 2020. V. 26(30). P. 6919–6934.
13. *Didraga C., Klugkist J. A., Knoester J.* Optical Properties of Helical Cylindrical Molecular Aggregates: The Homogeneous Limit // J. Phys. Chem. B. 2002. V. 106(44). P. 11474–11486.

УДК 537.3

Когерентная спиновая динамика в нанокристаллах $CsPbBr_3$ в стеклянной матрице

С. Р. Меляков[1,2]

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Перовскиты и их нанокристаллы (НК) в последние годы стали интересным объектом исследования для спиновой физики. Были продемонстрированы долгие времена спиновой релаксации и дефазировки при температуре жидкого гелия. Также недавно была обнаружена спиновая когерентность при комнатной

температуре с временами дефазировки порядка 50 пс [1]. Однако образцы с обычными коллоидными НК зачастую подвержены сильной деградации. Поэтому в данной работе мы исследуем НК перовскитов $CsPbBr_3$ в стекле, которые более устойчивы к внешнему воздействию.

Так же, как и для классических полупроводниковых систем, для исследования спиновой динамики в перовскитах может быть использован метод накачка-зондирование с пикосекундным временным разрешением с детектированием фарадеевской эллиптичности (ФЭ). В данной работе мы измеряем спиновую динамику в температурном диапазоне от 5 до 300 К в поперечных магнитных полях.

На рис. 1*а* приведен спектр фотолюминесценции (ФЛ) для НК $CsPbBr_3$. Пику ФЛ соответствует энергия 2.45 эВ. Сигнал ФЭ обычно детектируется при энергии кванта лазерного излучения близкой к пику ФЛ. На рис. 1*б* показаны динамики ФЭ в разных поперечных магнитных полях B. Характерное время затухания сигнала T_2^* (время спиновой дефазировки) составляет 60 пс при комнатной температуре. Осцилляции наблюдаемого сигнала соответствуют дырочной спиновой прецессии с частотой Лармора $\Omega_L = g\mu_B B$, где g — фактор Ланде носителя заряда, μ_B– магнетон Бора. Наклон зависимости Ω_L от B соответствует $g = 1.64$. При охлаждении до температуры $T = 4$ К время T_2^* возрастает до 200 пс, а g-фактор снижается до 1.37. Отдельно хочется отметить обнаруженные при низких температурах осцилляции сигнала в нулевом поле, которые вызваны взаимодействием спина дырок с ядрами. Было экспериментально показано, что энергия данного взаимодействия снижается с ростом размера НК.

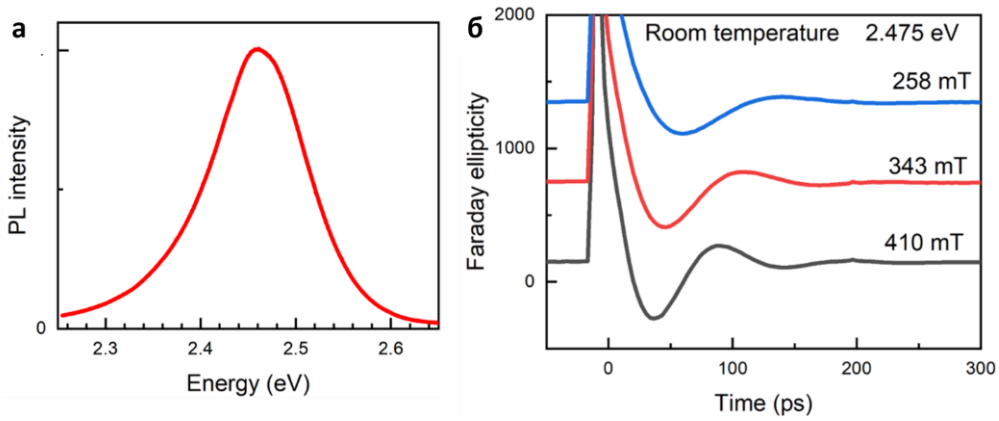


Рис. 1. Спектр ФЛ для НК CsPbBr3 (*а*). Динамики ФЭ в НК в НК CsPbBr3 в различных поперечных магнитных полях (*б*)

Литература

1. *Meliakov S.R.* [et al.]. Coherent Spin Dynamics of Electrons in CsPbBr3 Perovskite Nanocrystals at Room Temperature // Nanomaterials. 2023. V. 13(17): 2454.

УДК 537.52

Изучение временных характеристик излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита

***С. М. Климович*[1,2], *А. В. Бернацкий*[1], *С. Н. Андреев*[1], *А. П. Шевелько*[1], *С. Н. Цхай*[1], *С. Ю. Савинов*[1]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

За последнее время опубликован ряд работ [1–4], посвященных анализу излучения, инициируемого разрядом по поверхности феррита. Изучались временные характеристики излучения разряда, проводились оценки распределения этого излучения по диапазонам энергий посредством использования фильтров [2]. Была выделена предпробойная стадия разряда, изучались ее свойства, такие как направленность и когерентность [2]. В работе [5] с применением оптического спектрометра более подробно был изучен диапазон спектра 50–180 Å, были замечены электронные переходы в ионах кислорода.

В рамках данной работы была высказана идея объединения изучения спектральных характеристик излучения разряда с временными путем объединения спектрометра GIS-1 и цифрового осциллографа в единую систему на базе установки БАЦ [3–5] посредством волокон.

Разряд инициировался модифицированным рентгеновским аппаратом ПАМИР-300, обеспечивающим напряжение до 300 кВ с током разряда до 1 кА при фронте нарастания ~1 нс. Напряжение прикладывалось к ферриту марки М1000НН, со стороны анода располагался спектрометр.

На рис.1 представлено сравнение излучения в нулевом и первом порядке. Прослеживается различная структура излучения. Так, в нулевом порядке, аккумулирующем в себе все отраженное дифракционной решеткой излучение, виден резкий пик, который может быть интерпретирован как предпробойная составляющая [2]. На врезке рис. 1 продемонстрирован пример спектра, полученного на рентгеновскую пленку в аналогичных экспериментах [5].

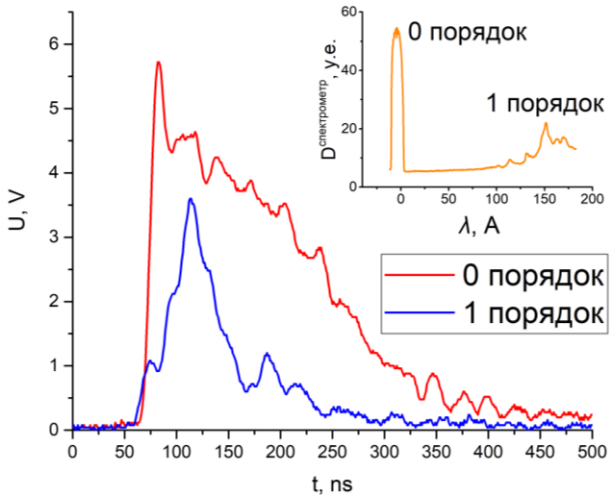


Рис. 1. Динамика излучения в нулевом и первом порядках

Работа выполнена за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-30086).

Литература

1. *Tilikin I. N.* [et al.]. Generation of Intense UV Radiation during High-Current Breakdown over a Ferrite Surface // Plasma Phys. Rep. 2018. V. 44. P. 600-604. DOI: 10.1134/S1063780X18060107.
2. *Tilikin I. N.* [et al.]. X-ray radiation induced by high-current breakdown on a ferrite surface // JPCS. 2022. V. 55: 405006. DOI: 10.1088/1361-6463/ac83cf.
3. *Andreev S. N.* [et al.]. Spatial characteristics of radiation initiated by a discharge over the ferrite surface // Bull. Lebedev Phys. Inst. 2021. V. 48. P. 321-326. DOI: 10.3103/S1068335621100031.
4. *Andreev S. N.* [et al.]. Spatial distributions of X-ray radiation during ferrite surface breakdown // JPCS. 2022. V. 2270: 012039. DOI: 10.1088/1742-6596/2270/1/012039.
5. *Климович С. М.* [и др.]. Исследование спектра излучения, инициируемого импульсным разрядом по поверхности феррита // Труды 65-й Всероссийской научной конференции МФТИ в честь 115-летия Л. Д. Ландау. Фундаментальная и прикладная физика. — М: Физматкнига, 2023. С. 338–339.

УДК 535.14, 535.18

Оптимизация пороговых параметров вырожденного четырехволнового смешения в интегральном кольцевом микрорезонаторе с двойной накачкой

***Н. С. Татаринова*[1,2], *А. Е. Шитиков*[2], *И. А. Биленко*[2,3], *В. Е. Лобанов*[2], *Д. А. Чермошенцев*[1,2,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[4]Сколковский институт науки и технологий

На сегодняшний день традиционные методы вычислений, коммуникаций проигрывают в скорости и качестве современным квантовым с использованием неклассических состояний света. Одним из способов получить сжатый свет является параметрическая генерация в интегральных кольцевых микрорезонаторах с $\chi^{(3)}$-нелинейностью с бихроматической накачкой за счет вырожденного четырехволнового смешения (ЧВС) [1]. Несмотря на продемонстрированные возможности такого метода, в литературе еще не

были определены пороговые параметры, при которых осуществляется генерация сжатых состояний в рассматриваемой системе. Целью данной работы является определение оптимальных параметров системы, такие как минимальная суммарная мощность накачки двух лазерных диодов и соответствующие характеристики микрорезонатора, при которых возможна генерация сжатого света. В данной работе рассматривается микрорезонатор с нормальной дисперсией, поскольку такие системы лучше подходят для генерации параметрического сигнала в предложенной конфигурации [2].

Для решения поставленной задачи были смоделированы уравнения связанных мод в нормированных на полуширину полного резонанса микрорезонатора единицах [3]:

$$\frac{\partial a_\mu}{\partial \tau} = -(1 - i\zeta_\mu)a_\mu + i\sum_{\mu' \le \mu''}\left[(2 - \delta_{\mu',\mu''})a_{\mu'}a_{\mu''}a^*_{\mu'+\mu''-\mu}\right] + \delta_{+n,\mu}f_{+n} + \delta_{-n,\mu}f_{-n}; \quad (1)$$

$$\zeta_\mu = \frac{\zeta_+ + \zeta_-}{2} + \frac{\zeta_+ - \zeta_-}{2n}\mu + \frac{d_2}{2}(n^2 - \mu^2), \quad (2)$$

где a_μ — нормированная комплексная амплитуда μ-й моды микрорезонатора, ζ_μ — нормированная отстройка частоты от соответствующей частоты резонансной моды ($\zeta > 0$ соответствует синей отстройке), $\pm n$ — индексы резонансных мод, ближайших к частотам накачек, $f_{\pm n}$ — нормированные амплитуды мощности лазерных диодов, $\zeta_\pm$ — нормированные отстройки частоты накачек, d_2 — нормированный коэффициент дисперсии второго порядка, τ — нормированное время, δ — символ Кронекера. В дальнейшем считаем, что система сканируется симметрично ($\zeta_+ = \zeta_-$, $f_+ = f_-$).

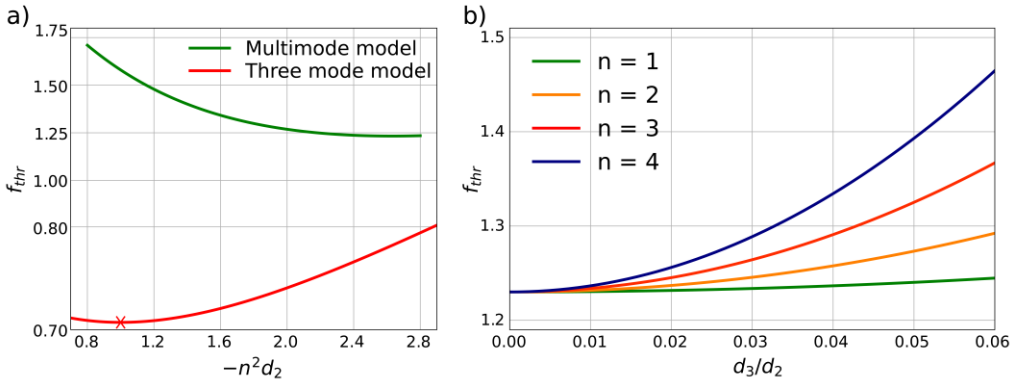


Рис. 1. Зависимость пороговой частоты от параметров системы (*а*) в модели трех мод (красная линия) и многомодовой (зеленая линия). Красный крест соответствует аналитически определенным оптимальным значениям в случае трехмодовой модели. Зависимость пороговой частоты от отношения нормированных коэффициентов (*б*) дисперсий третьего ко второму порядков d_3/d_2.

Из упрощенной модели, в которой рассматриваются только три моды микрорезонатора, центральная и две моды накачки ($\mu = 0, \pm n$), аналитически получена зависимость пороговой частоты от параметров системы:

$$f_{thr}^2 = \frac{1}{6}\left(d_2n^2 + 2\sqrt{3 + (d_2n^2)^2}\right). \quad (3)$$

Отсюда были определены оптимальные значения $f_{thr} = 1/\sqrt{2}$, $d_2n^2 = -1$. Однако данные результаты неприменимы к полной модели, где присутствуют паразитные невырожденные процессы ЧВС [3]. Численно были получены новые оптимальные параметры $f_{thr} = 1.23$, $d_2n^2 = -2.6$. В многомодовой модели также сохраняется вырожденность пороговой амплитуды накачки от индексов мод накачек при фиксированном значении параметра d_2n^2 (рис. 1*а*), которая снимается при добавлении в модель дисперсии более высоких порядков (рис. 1*б*).

При полученных оптимальных параметрах были численно получены степени сжатия центральной моды в обеих моделях. При мощностях меньше пороговых значений внутри микрорезонатора на частоте центральной нулевой моды генерируется состояние, степень сжатия которого превышает 20 дБ. При повышении мощности нулевая мода принимает одно из двух возможных значений, разность фаз между которыми составляет π. Результаты моделирования продемонстрированы на рис. 2.

Полученные результаты предоставляют возможность для создания автономного устройства с алгоритмом включения для генерации неклассических состояний света с высокой степенью сжатия в системах с самозатянутыми лазерными диодами.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 23-42-00111).

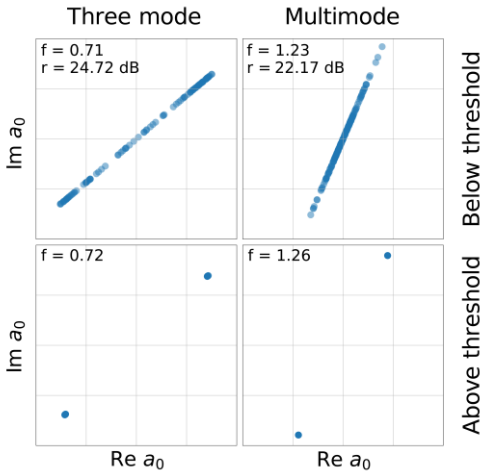


Рис. 2. Представление на комплексной плоскости амплитуды центральной моды внутри микрорезонатора в подпороговом и надпороговом режимах генерации в трехмодовой и многомодовой моделях

Литература

1. *Okawachi Y.* [et al.]. Demonstration of chip-based coupled degenerate optical parametric oscillators for realizing a nanophotonic spin-glass // Nat. Commun. 2020. V. 11(1): 4119.
2. *Okawachi Y.* [et al.]. Dual-pumped degenerate Kerr oscillator in a silicon nitride microresonator // Opt. Lett. 2015. V. 40. P. 5267–5270.
3. *Herr T.* [et al.]. Universal formation dynamics and noise of Kerr-frequency combs in microresonators // Nature Photon. 2012. V. 6(7). P. 480–487.
4. *Seifoory H.* [et al.]. Degenerate squeezing in a dual-pumped integrated microresonator: Parasitic processes and their suppression // Phys. Rev. A. 2022. V. 105(3): 033524.

УДК 539.186.3

Методика быстрого управления диполь-дипольными взаимодействиями в плотном газе рубидия

***С. В. Климов*[1,2], *С. А. Саакян*[2], *В. А. Саутенков*[2], *Б. Б. Зеленер*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Оптические среды, в которых величина взаимодействия между атомами, сравнима с их кинетической энергией, являются интересным объектом для исследования. В частности, необычные оптические эффекты демонстрируют среды, в которых существенно диполь-дипольное взаимодействие. Такой средой может быть, например, плотный атомный газ. Если газ резонансный (частота падающего излучения близка к частоте перехода в атомах газа), а также достаточно плотный (плотность больше куба волнового числа падающего излучения $\rho > k^3$), он может демонстрировать такие свойства, как дипольная блокада [1], диполь-дипольное уширение [2], неклассическое рассеяние фотонов [3], коллективный сдвиг Лэмба [4, 5].

Величина диполь-дипольного взаимодействия в таких газах является ключом к управлению их оптическими свойствами. Если научиться быстро управлять величиной этого взаимодействия, то на основе плотного резонансного газа можно будет создавать регулируемые оптические устройства и использовать их, например, в интегрированных фотонных структурах [6]. Эффект дипольной блокады может быть, по аналогии с ридберговской блокадой [7], полезен для реализации квантовых вычислений.

В данной работе предлагается способ такого управления и его экспериментальная реализация. Оптической средой здесь служит газ природной смеси изотопов ^{85}Rb и ^{87}Rb с плотностью 10^{16}–10^{17} см$^{-3}$. Рубидий находится в уникальной стеклянной кювете, которая может нагреваться до температур, близких к 400°C. Регулируя температуру в кювете, можно регулировать и плотность газа. Переходы в D_2-линии ^{85}Rb (780 нм) позволяют реализовать в такой среде способ управления диполь-дипольным взаимодействием, описанный ниже.

Управление взаимодействиями в газе возможно за счет быстрого изменения населенности основного и возбужденного состояний. При переходе атомов из основного состояния в возбужденное величина

диполь-дипольного взаимодействия уменьшается. Такой процесс в данной работе реализуется при помощи мощного (до 3 Вт) резонансного лазерного излучения. Этот луч в дальнейшем будем называть лучом накачки. При попадании его в кювету происходит оптическая накачка атомов рубидия в возбужденное состояние и величина диполь-дипольного взаимодействия быстро уменьшается.

Чтобы ускорить управление величиной диполь-дипольного взаимодействия, необходимо быстро включать луч накачки. Такое включение реализуется при помощи ячейки Поккельса, поляризационного светоделителя (PBS) и λ-пластинки. При подаче напряжения ячейка Поккельса приобретает свойства одноосного кристалла, в связи с чем меняется поляризация попадающего в нее излучения. Управляя таким образом поляризацией, можно менять коэффициенты отражения и пропускания PBS, что по сути и является включением. Время этого процесса ограничено лишь временем подачи напряжения на ячейку Поккельса и имеет порядок наносекунды.

Для проведения эксперимента недостаточно лишь подходящей среды, необходимо также наблюдение за ее параметрами. Одним из таких параметров является сигнал селективного отражения излучения от границы между окном кюветы и газом рубидия. Для наблюдения за селективным отражением используется маломощный (до нескольких мВт) пробный луч, который, в отличие от луча накачки, в хорошем приближении не влияет на систему и поэтому пригоден для измерений. Меняя состояние системы при помощи изменения мощности луча накачки и температуры кюветы, мы можем наблюдать за ней при помощи пробного луча.

Упрощенная схема эксперимента приведена на рис. 1. Луч накачки проходит через PBS, λ-пластинку и ячейку Поккельса, затем отражается зеркалом и проходит через них же в обратном порядке. Если ячейка не находится под напряжением, луч отражается от PBS и попадает в линзу, где фокусируется в кювету вместе с пробным лучом. Затем все отраженные лучи, кроме отражения пробного луча от границы раздела сред, блокируются поглощающим элементом, а последний попадает в оптоволокно и оттуда в фотоприемник. Были получены предварительные результаты сигнала селективного отражения для быстрого переключения луча накачки.

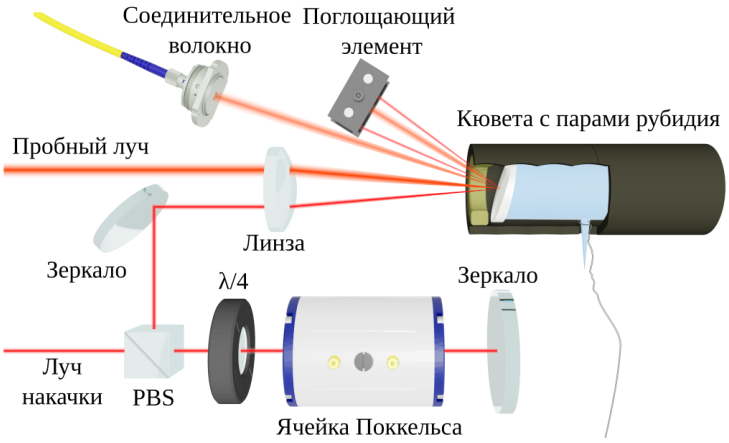


Рис. 1. Упрощенная схема эксперимента

Ввиду сложности получения достаточно плотного газа, подобные среды на данный момент малоизучены экспериментально. Чтобы достичь подобных плотностей нагревнием, нужна кювета, подобная той, которая используется в работе, а их нет в массовом производстве. Альтернативно получить высокие плотности можно при помощи десорбции атомов со стенок кюветы коротким лазерным импульсом [8]. Полное теоретическое описание процессов, рассматриваемых в данной работе, также отсутствует. Таким образом, данная работа, наряду с уже проведенными нашим коллективом работами по этой теме [9–11], имеет актуальную научную новизну и перспективы на дальнейшие исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант #23-22-00200).

Литература

1. *Lukin M. D.* [et al.]. Dipole blockade and quantum information processing in mesoscopic atomic ensembles // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87(3): 037901.
2. *Lewis E. L.* Collisional relaxation of atomic excited states, line broadening and interatomic interactions // Phys. Rep. 1980. V. 58(1). P. 1–71.
3. *Williamson L. A., Borgh M. O., Ruostekoski J.* Superatom picture of collective nonclassical light emission and dipole blockade in atom arrays // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 125(7): 073602.
4. *Lamb Jr W. E., Retherford R. C.* Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method // Phys. Rev. 1947. V. 72(3). P. 241.

5. *Friedberg R., Hartmann S. R., Manassah J. T.* Frequency shifts in emission and absorption by resonant systems ot two-level atoms // Phys. Rep. 1973. V. 7(3). P. 101–179.
6. *Alaeian H.* [et al.]. Cavity QED based on room temperature atoms interacting with a photonic crystal cavity: a feasibility study // Appl. Phys. B. 2020. V. 126. P. 1–10.
7. *Saffman M., Walker T. G., Mølmer K.* Quantum information with Rydberg atoms // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82(3): 2313.
8. *Christaller F.* [et al.]. Transient Density-Induced Dipolar Interactions in a Thin Vapor Cell // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 128(17): 173401.
9. *Sautenkov V. A.* [et al]. Dipole-dipole broadened line shape in a partially excited dense atomic gas // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77(16): 3327.
10. *Sautenkov V. A.* [et al.]. Spectral profiles of strongly saturated resonance transitions in high-density rb vapor // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 278: 108007.
11. *Sautenkov V. A.* [et al.]. Pump-probe studies of resonantly saturated selective reflection from high-density rubidium vapor // arXiv preprint. [2023] arXiv: 2312.06243.

УДК 535:530.182

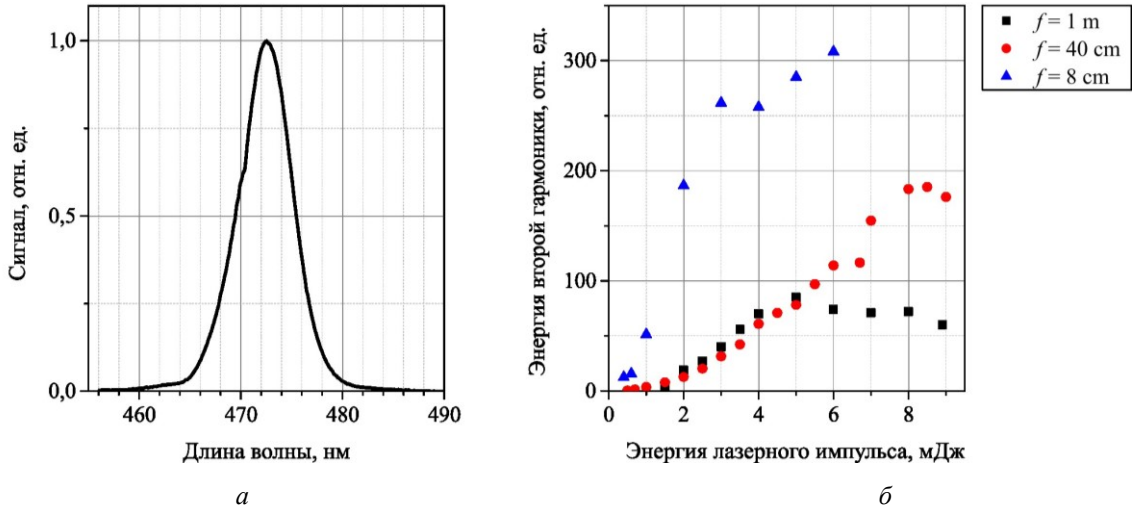
Генерация второй гармоники в плазме лазерного филамента

***Т. А. Дик*[1], *Г. Э. Ризаев*[2], *Д. В. Пушкарев*[2], *А. В. Корибут*[1,2], *М. В. Левусь*[2,3], *Л. В. Селезнев*[2]**

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

При прохождении мощного лазерного пучка через прозрачную среду ее оптические характеристики, такие как показатель преломления, становятся зависимыми от напряженности поля световой волны. Это может приводить к самофокусировке излучения и ионизации молекул среды. Излучение дефокусируется на образованной плазме, в результате импульс распространяется вдоль тонкого канала, называемого филаментом. В плазме лазерного филамента возможна генерация гармоник. В случае изотропной среды генерация четных гармоник наблюдаться не должна; нечетные гармоники, например третья, регистрируются в эксперименте, коэффициент преобразования лазерного излучения составляет порядка 10^{-3} [1]. В нашей работе экспериментально зарегистрировано излучение второй гармоники, генерируемое в плазме филамента, коэффициент преобразования составил 10^{-9}.

Эксперимент проводился на титан-сапфировой лазерной системе с центральной длиной волны 950 нм, длительностью импульса 90 фс и энергией до 10 мДж. Пучок диаметром примерно 1 см (по уровню 1/e) с горизонтальной поляризацией проходил через дифракционный ослабитель и фокусировался с помощью различных линз. За областью филаментации для отсечения основной частоты находились дихроичное зеркало и светофильтр СЗС22. Далее линза с фокусным расстоянием 5 см собирала пучок в спектрометр для измерения выхода второй гармоники в зависимости от энергии лазерного импульса.



а *б*

Рис. 1. Пример зарегистрированного спектра второй гармоники (*а*); зависимость энергии второй гармоники, генерируемой в плазме филамента, от энергии лазерного импульса при различной фокусировке (*б*)

Спектры второй гармоники были получены интегрированием сигнала по всему спектру (в диапазоне 460–480 нм). Пример одного из таких спектров представлен на рис. 1*а*. Измерения зависимости энергии второй гармоники от энергии лазерного импульса проводились при различных фокусировках и их результат представлен на рис. 1*б*. Зависимости при фокусировках 1 м и 40 см схожи: вначале происходит нарастание по параболической зависимости, а далее происходит насыщение. При фокусировке 8 см энергия второй гармоники существенно выше, насыщение происходит при меньших энергиях лазерного импульса, а отсутствие точек с энергией более 6 мДж обусловлено влиянием конической эмиссии, из-за чего возникали существенные погрешности.

Таким образом, в работе была экспериментально обнаружена вторая гармоника, генерируемая в филаментационной плазме, а также была получена зависимость энергии второй гармоники от энергии лазерного импульса при различных фокусировках. Увеличение жесткости фокусировки приводит к увеличению выхода второй гармоники.

Литература

1. *Ionin A. A.* [et al.]. Third Harmonic Generation by Ultrashort Laser Pulses Tightly Focused in Air // Laser Physics. 2011. V. 21(3). P. 500–504.

УДК 539.184

Возбуждение радиочастотного перехода в иттербии-171 для квантовых вычислений

***Н. В. Семенин*[1,2], *М. И. Шакиров*[1,2], *А. С. Борисенко*[1,2], *И. В. Заливако*[1,2], *Ю. П. Аносов*[1,2]**

[1]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[2]Российский квантовый центр

Электронные уровни иона иттербия-171 — хорошая физическая платформа для реализации одного или нескольких кубитов. Структура электронных уровней позволяет реализовать как лазерное охлаждение, так и интерфейс изменения и считывания состояний кубитов. На данный момент оптический кубит реализован следующим образом: за $|0\rangle$ принимается уровень $^2S_{1/2}$ F = 0, а за $|1\rangle$ - $2D_{3/2}$ F = 2 mf = 0.

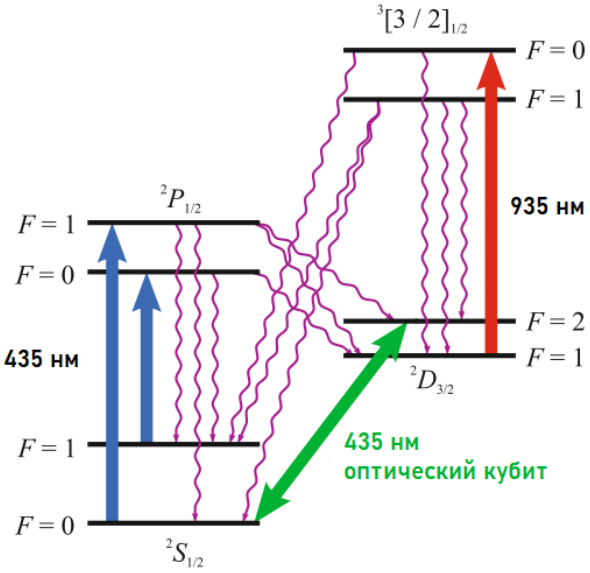


Рис. 1. Структура уровней 171Yb+

Уже собранный в нашей лаборатории квантовый вычислитель представляет из себя помещенные в вакуумную камеру ловушку Пауля и атомную пушку. В вакуумную камеру заводится излучение двух лазеров: 369 и 935 нм. На лазере с длиной волны 369 нм выполняется доплеровское охлаждение. Так как с используемого при лазерном охлаждении $^2P_{1/2}$ уровня возможен переход на $^2D_{3/2}$ уровень, при помощи лазера с длиной волны 935 нм индуцируется переход на промежуточный уровень, имеющий малое время жизни, с него электрон переходит в искомое $^2S_{1/2}$ состояние. Чтобы перевести ионы в ловушке в состояние $^2S_{1/2}$ F = 0 меняется частота модуляции излучения лазера с длиной волны 369 нм. Таким

образом инициализируется состояние |0⟩ для всех ионов в ловушке. Далее мы можем проводить необходимые нам операции над подготовленным кубитом. Подсвечивая ионы лазером и считывая флуоресценцию или ее отсутствие, мы можем трактовать состояние кубита как |0⟩ или |1⟩ соответственно. На каждом из этапов работы квантового компьютера возможны ошибки, связанные со спонтанными и нерезонансными переходами электрона на какую-либо орбиту, что негативно сказывается на достоверности вычислений. Как показано в одной из статей нашей лаборатории [1], хороший прирост к достоверности дает перевод состояния $^2S_{1/2}$ F = 0 в состояние $^2S_{1/2}$ F = 1 перед считыванием.

Для обмена населенностями между $^2S_{1/2}$ F = 0 и $^2S_{1/2}$ F = 1 необходимо подать Pi импульс на частоте 12,6 ГГц. С этой целью был собран блок СВЧ электроники, а также изготовлена антенна-монополь. В результате экспериментов мы действительно получили улучшение достоверности вычислений: без Pi импульса на частоте 12,6 ГГц достоверность считывания составила 98,24%, с Pi импульсом — 98,90%.

Более того, как показано в недавних исследованиях [2], кропотливо организованный эксперимент позволяет получить крайне высокие времена когерентности для кубита на радиочастотном переходе, в сравнении кубитом на оптическом переходе. В этом случае за |0⟩ и |1⟩ принимаются подуровни $^2S_{1/2}$ с F = 0 и F = 1 соответственно. Поставив эксперимент, для радиочастотного кубита мы получили достоверность однокубитной операции 99,94%.

Литература

1. *Семенин Н. В.* [и др.]. Оптимизация достоверности считывания квантового состояния оптического кубита в ионе иттербия 171Yb+ // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2021. Т. 114. № 8. С. 553–559.
2. *Wang P.* [et al.] Single ion qubit with estimated coherence time exceeding one hour //Nature communications. 2021. V. 12(1). P. 233–241.

УДК 537.53, 537.52

Исследование рентгеновского излучения искрового разряда на установке ЭРГ

***Я. К. Болотов*[1,2]**

[1]Московский физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ведутся исследования искрового лабораторного разряда в атмосферных условиях [3, 4], в том числе на установке ЭРГ [1, 2, 5–9]. Все еще не известен механизм подобного разряда, его лабораторное исследование может дать существенно-новую информацию, необходимую для понимания процессов, протекающих в природных молниях.

В ходе работы была получена пространственная локализация источника излучения (рис. 1). Использовалась определенная конфигурация электродов: «обратноконический катод и острием — сетчатый анод». Данная конфигурация дает максимальное количество статистически значимых данных исследования. Впервые измерено распределение энергетических параметров рентген- и гамма-излучения при пробое вдоль разрядной оси. Разрешение пространственного измерения — 10–12 см, время нарастания фронта примерно 220 нс, максимальное напряжение — 1,2 МВ, расстояние между электродов — 60,5 см. Оценка энергии квантов излучения была проведена с помощью свинцовых фильтров ступенчатого ослабления.

Наибольшую энергию излучения наблюдают в областях, близких к аноду. В области прикатода интенсивность излучения значительно ниже. Амплитудные спектры излучения из прианодной зоны имеют минимальную энергию, превышающую энергию из прикатодной зоны приблизительно в три раза. В межэлектродном пространстве излучение в разы (3–8 раз) меньше, чем в прианодной зоне.

Полученные результаты указывают на то, что прианодная область является основным источником ионизирующего излучения, что согласуется с предполагаемым механизмом его возникновения, связанным с замедлением быстрых (релятивистских) электронов. Максимальная энергия зарегистрированного рентгеновского излучения не превышает 400 кэВ.

Тормозное излучение ионов и электронов может быть причиной рентгеновского излучения, которое мы наблюдаем. Оно возникает при их взаимодействии с поверхностями электродов или по другим механизмам. Обнаруженное явление будет изучаться в последующих работах.

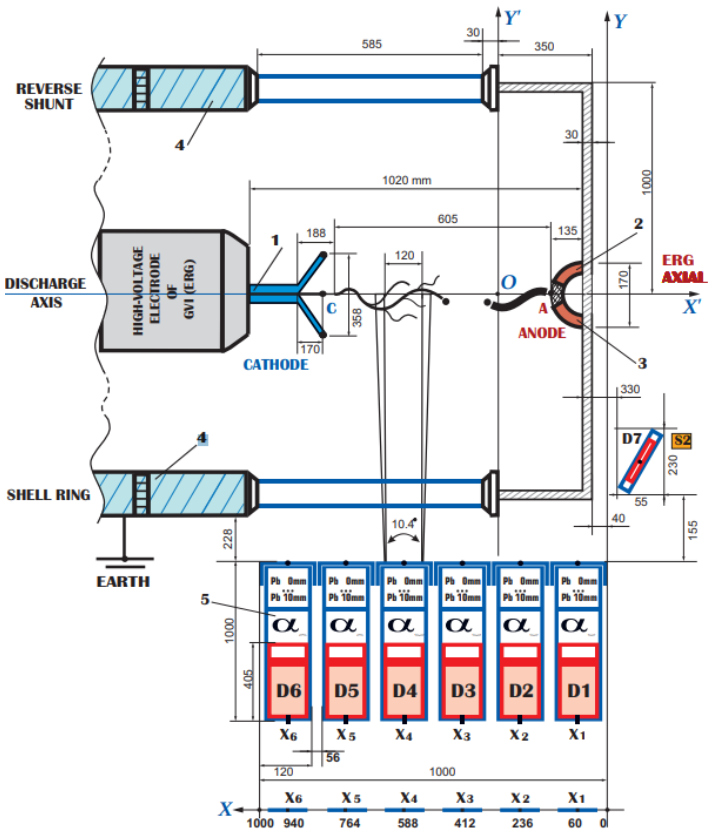


Рис. 1. Схема эксперимента

Литература

1. *Родионов А. А.* [и др.]. Исследование областей генерации жестких ионизирующих излучений в атмосферном разряде // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2022. Т. 116. № 4. С. 225–232.
2. *Dwyer J. R.* [et al.]. Observation of a gamma-ray flash at ground level in association with a cloud-to-ground lightning return stroke // Journal of Geophysical Research: Space Physics. 2012. V. 117: A10.
3. *Kochkin P.* [et al.]. Analyzing x-ray emissions from meter-scale negative discharges in ambient air //Plasma Sources Science and Technology. 2016. V. 25(4): 044002.
4. *Agafonov A. V.* [et al.]. Observation of hard radiations in a laboratory atmospheric high-voltage discharge //Journal of Physics D: Applied Physics. 2017. V. 50(16): 165202.
5. *Parkevich E. V.* [et al.]. Streamer formation processes trigger intense x-ray and high-frequency radio emissions in a high-voltage discharge //Physical Review E. 2022. V. 105(5): L053201.
6. *Rodionov A. A., Oginov A. V., Shpakov K. V.* Photomultiplier-based scintillation radiation detectors of increased sensitivity and time resolution for measurements under conditions of high electromagnetic interference //Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2018. V. 82. P. 404–408.

Секция современных проблем теоретической физики и физики конденсированного состояния

Председатель: В. В. Рязанов (д. ф.-м. н., профессор)

Зам. председателя: Н. А. Степанов (к. ф.-м. н.)

Секретарь: Г. С. Селезнев

Дата: 05.04.2024 Время: 10:00

УДК 538.945

Глубокое квантовое обучение в цепочках сверхпроводниковых кубитов-трансмонов

***А. Е. Толстобров*[1,4], *Г. П. Федоров*[1,2,4], *Ш. В. Сандуляну*[1,2,4], *Д. А. Калачева*[1,2,3], *А. Н. Болгар*[1,3], *В. Б. Лубсанов*[1], *Ш. В. Кадырметов*[1], *А. В. Васенин*[1,3], *П. Ю. Шлыков*[1], *А. Ю. Дмитриев*[1,4], *О. В. Астафьев*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[23]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС
[3]Сколковский институт науки и технологий
[4]Российский квантовый центр

Возможность использования сверхпроводниковых кубитов для решения задач машинного обучения представляет большой интерес для научного сообщества в последние годы [1, 2]. Экспериментальное решение задачи бинарной классификации на таких системах уже было реализовано [3]. В данной работе мы успешно решили 3 задачи классификации для различных наборов данных — задача четности, определение рака молочной железы (бинарная классификация) и классификация вин (многоклассовая классификация). Также была решена задача распознавания изображений (классификация с 10 метками). Принципиальная схема работы алгоритма изображена на рис. 1.

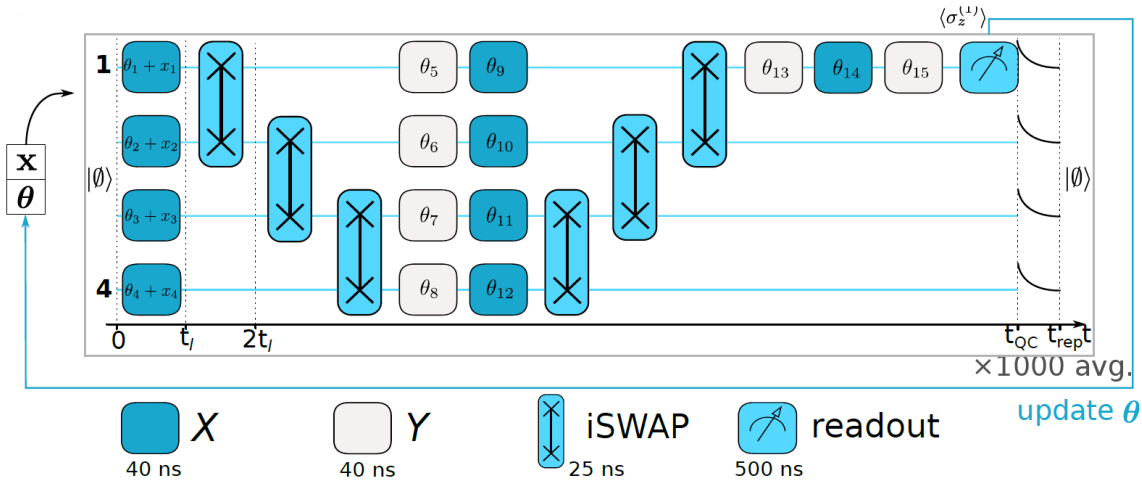


Рис. 1. Схема работы алгоритма. Запись данных (X_1 — X_4) производится в параметры первого слоя однокубитных операций. Дальнейшие слои состоят из чередующихся слоев двухкубитных операций i-Swap и слоев однокубитных операций, с оптимизируемыми параметрами

Подобрав параметры цепочки $\Theta_1 - \theta_{15}$ с помощью градиентного спуска, удается добиться хорошего разделения двух классов в задачах бинарной классификации. В этом случае к одному классу относят те объекты, для которых $\langle\sigma_z\rangle > 0$, а ко второму те, для которых $\langle\sigma_z\rangle < 0$. Работоспособность алгоритма была протестирована на трех различных задачах. В задаче четности требуется определить четность

бинарной последовательности длины 4. Данная задача является тестом работоспособности нашей системы и воспроизводимости операций. Она имеет точное решение, а размер обучающей выборки составляет $2^4 = 16$. Все это позволяет достичь точности классификации 100% на данной задаче. Следующая задача — диагностирование рака молочной железы по результатам биопсии — является более сложной, так как размер обучающей выборки составляет уже несколько сотен, а данные не имеют явных закономерностей. С помощью квантовой цепочки на данной задаче удается добиться точности классификации 95%. Последняя из рассмотренных задач — задача классификации вин — является наиболее интересной в данном контексте, так как требует классификации на 3 сорта. Для классификации на 3 класса использовалась модификация описанного алгоритма, которая включала в себя 3 запуска алгоритма для решения задачи «один против всех», после чего выбирался класс, вероятность которого является наивысшей. Данным способом удалось добиться точности 94%, что сопоставимо с точностью, получаемой классическими методами машинного обучения. Полученные результаты систематизированы на рис. 2.

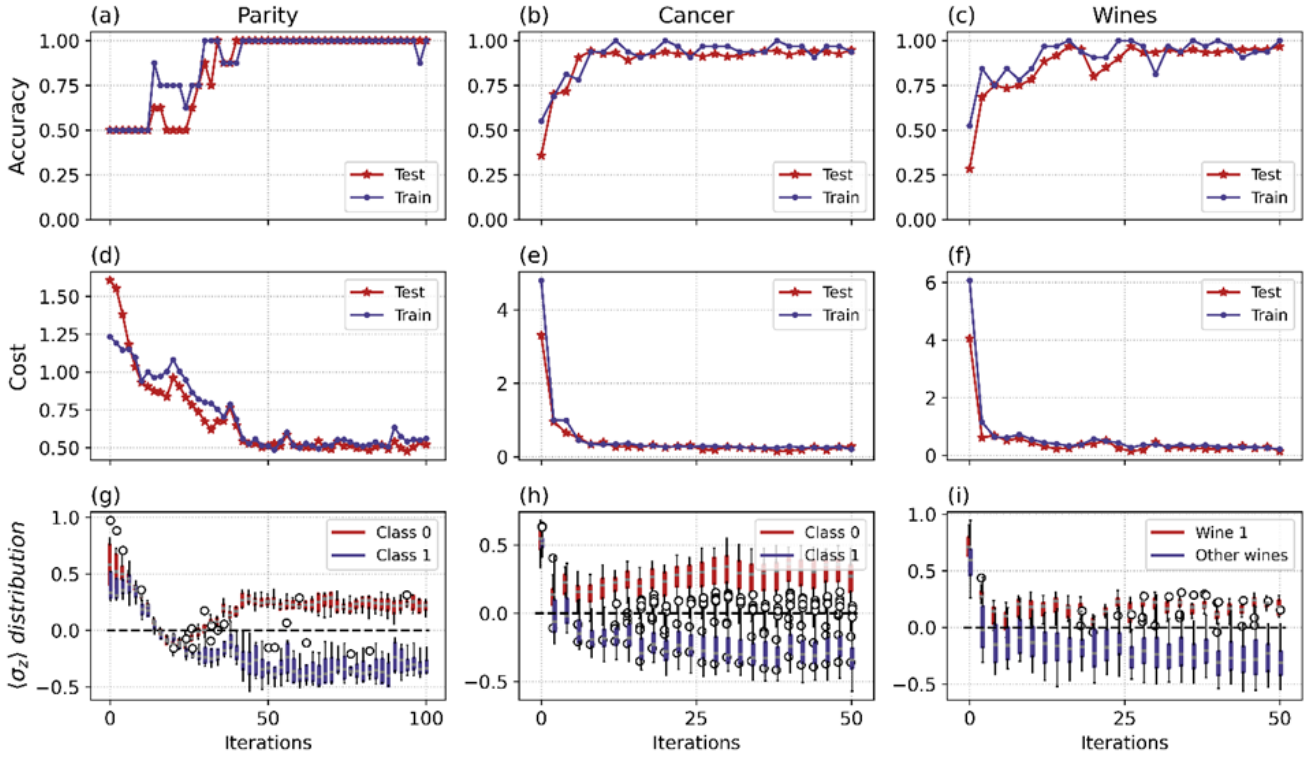


Рис. 2. Визуализация процесса обучения. По строкам построены точность, значение функции потерь и разделение двух классов в зависимости от числа итераций. Разным столбцам соответствуют задача четности, диагностирование рака молочной железы и классификация вин

С помощью похожей квантовой цепочки была также решена задача распознавания изображений. В качестве исходных данных использовались рукописные изображения цифр от 0 до 9 из стандартного набора данных MNIST. Каждое изображение имело разрешение 7*8 пикселей. Квантовая цепочка, выбранная для решения данной задачи, изображена на рис. 3. Для преобразования изображения в параметры квантовой цепочки использовались сверточные слои классических нейронных сетей.

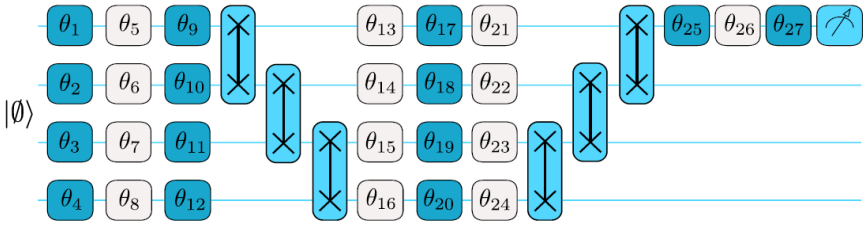


Рис. 3. Схема квантовой цепочки для решения задачи распознавания изображений

С помощью описанной квантовой цепочки удалось достигнуть точности 90% для задачи классификации изображений с 10 метками. Визуализация процесса обучения квантовой цепочки представлена на рис. 4.

Работа выполнена при поддержке ГК «Росатом» в рамках реализации дорожной карты «Квантовые вычисления» (Договор № 868-1.3-15/15-2021 от 5 октября 2021 г. и Договор № МЦКТ-2 от 14 июля 2022 г.). Авторы благодарят А. Стрельникова и А. Кабанова за ценную техническую поддержку. Все образцы были изготовлены в Центре коллективного пользования (ЦКП МФТИ) и ОПБ Института квантовых технологий МФТИ.

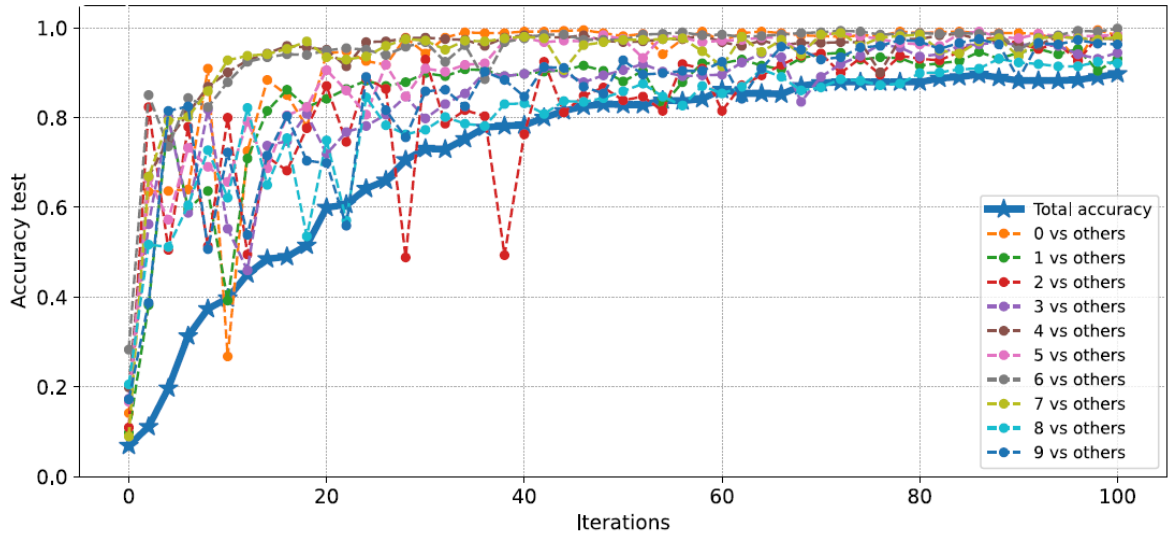


Рис. 4. Визуализация процесса обучения для задачи распознавания изображений. Построена точность классификации в зависимости от числа итераций для всех 10 классификаторов и итоговая точность классификации

Литература

1. *Schuld M., Killoran N.* Quantum machine learning in feature hilbert spaces // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122(4): 040504.
2. *Mitarai K.* [et al.]. Quantum circuit learning // Phys. Rev. A. 2018. V. 98(3): 032309.
3. *Ren W.* [et al.]. Experimental quantum adversarial learning with programmable superconducting qubits // Nat. Comput. Sci. V. 2(11). P. 711–717.

УДК 530.145

Индуктивно шунтированные кубиты-трансмоны с высоким ангармонизмом

***А. С. Кирковский*[1], *Д. А. Калачева*[1,2,3], *Ю. И. Зотова*[1,2,3], *Г. П. Федоров*[1,3,4], *А. Ю. Дмитриев*[1,4], *О. В. Астафьев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС
[4]Российский квантовый центр

Одной из наиболее перспективных технологий для создания квантовых устройств являются микросхемы на основе сверхпроводников [1]. В большинстве реализаций таких цепей используются искусственные атомы типа трансмон — зарядовые кубиты, шунтированные большой емкостью. Такие кубиты обладают большим временем когерентности, однако имеют малый ангармонизм [2].

Для решения данной проблемы предлагается модифицировать кубит-трансмон, добавив в схему большую шунтирующую индуктивность. В качестве активного элемента используется нанопроволока из ультратонкого алюминия [3]. Таким образом, в рамках данной работы исследуется гибридная система, обладающая свойствами трансмона и потокового кубита одновременно. Гамильтониан такого кубита имеет вид:

$$H = -E_C \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - E_{J1} \cos(\varphi + k\varphi_{ext}) - E_{J2} \cos(\varphi - (1-k)\varphi_{ext}) + \frac{1}{2} E_L \varphi^2, \quad (1)$$

где φ — поток, E_C, E_J, E_L — емкостная, индуктивная и джозефсоновская энергии соответственно, φ_{ext} — внешний поток, k — константа, определяемая соотношением площадей.

В работе рассматривается поведение спектра такого кубита в зависимости от параметров энергий и величины k, которые задаются при проектировании дизайна образца, и внешнего потока, который можно менять непосредственно в эксперименте. Для симметричного кубита ($k = 1/2$) наблюдаются режимы, соответствующие потоковому кубиту и ангармоническому осциллятору. В случае сильно несимметричного кубита ($k \to 1$) наблюдается режим, аналогичный кубиту-трансмону.

В рамках данного исследования производится поиск оптимальных параметров, при которых достигаются наибольшие значения емкостной энергии и ангармонизма. Актуальной для нас задачей является анализ применимости таких кубитов в многокубитных микросхемах.

В результате выполнения работы было показано, что для гибридного кубита в режиме трансмона возможно увеличить ангармонизм в два раза по сравнению с кубитами-трансмонами, произведенными по той же технологии. Предполагается, что с использованием гибридной схемы можно уменьшить характерный размер кубитов по сравнению с трансмонами, при этом сохраняя высокую устойчивость к зарядовому шуму и большие времена когерентности.

Литература

1. *Preskill J.* Quantum Computing in the NISQ era and beyond Quantum. 2018. V. 2: 79.
2. *Houck A. A.* [et al.]. Life after charge noise: recent results with transmon qubits Quantum Inf. Process. 2009. V. 8. P. 105–115.
3. *Kalacheva D.* [et al.]. Coplanar superconducting resonators with nonlinear kinetic inductance bridge // Supercond. Sci. Technol. 2023. V. 36(5): 055011.

УДК 538.9

Локальная электронная структура антиферромагнетика $CeCo_2P_2$, проявляющего эффект Кондо

***А. А. Минаев*[1], *А. С. Фролов*[1,2], *В. С. Столяров*[1]**

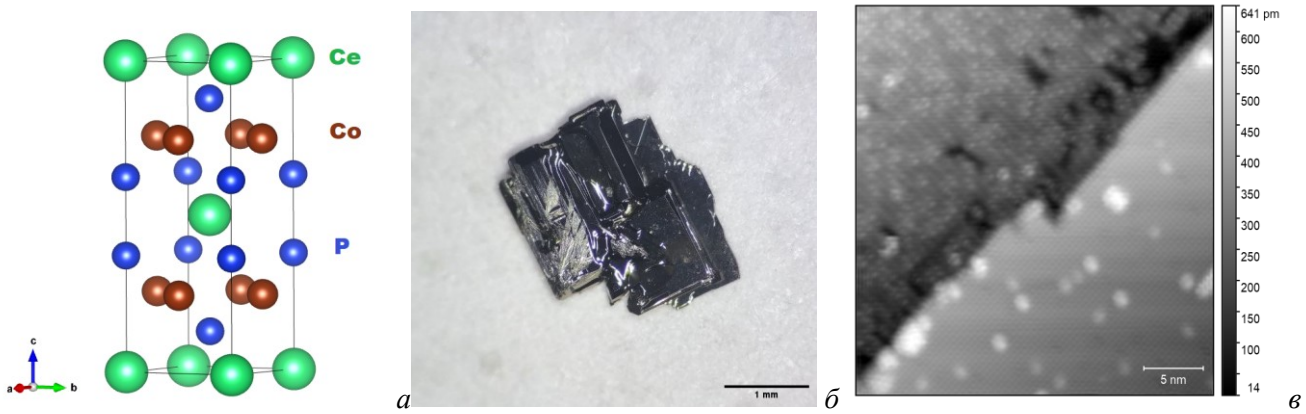
[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В последнее время особое внимание уделяется 4f-соединениям, являющимся примером сильно коррелированных систем, где реализуются необычные объемные эффекты, такие как сверхпроводимость, смешанная валентность, магнетизм или проявление эффекта Кондо. Однако поверхностные явления являются не менее интересными, но мало изученными. Так на поверхности может возникнуть реконструкции и релаксации, также Кондо эффект, которого может и не быть в объеме, а локальная электронная структура ведет себя иначе, чем в глубине материала. Поверхностные волновые функции экспоненциально затухают в объеме, однако, они все же проникают на глубину нескольких атомарных слоев, что позволяет реализовать одновременное взаимодействие нескольких атомарных слоев друг с другом, основанное на различных эффектах: обменный магнетизм, спин-орбитальное взаимодействие, Кондо взаимодействие. Таким образом, их комбинация может позволить реализацию новых физических явлений и помочь в разработке систем с управляемыми двумерными магнитными и спиновыми свойствами [1].

Примером таких материалов является $CeCo_2P_2$, который демонстрирует поверхностную кондо решетку, образованную атомами церия [2]. Она взаимодействует с ферромагнитным слоем Co_2P_2, из-за чего поверхностные состояния приобретают спиновую поляризацию. Метод сканирующей туннельной микроскопии является методом чувствительным к локальной электронной структуре поверхности, которая может быть использован для обнаружения поверхностных электронных состояний.

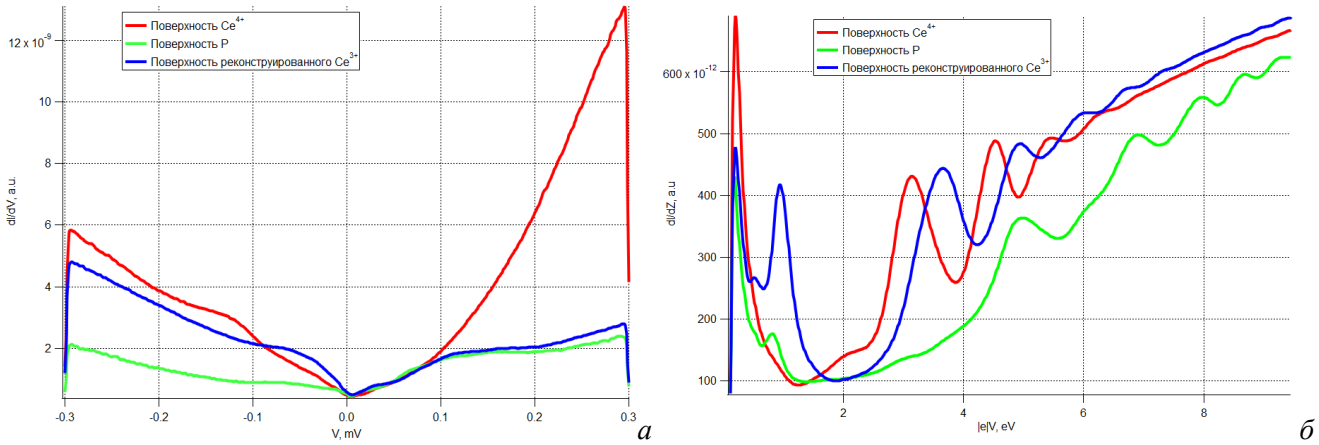
Были обнаружены три принципиально разные терминации, причем одна из них является реконструированной поверхностью 2 к 1, как это показано на рис. 1. Для определения работы выхода разных терминаций были измерены спектры резонансно полевой эмиссии. Обнаружено, что поверхность, терминированная атомами церия, демонстрирует работу выхода $\phi = (2.5 \pm 0.1)eV$, а атомами фосфора $\phi = (4.2 \pm 0.3)eV$. Данные величины согласуются известными значения работы выхода для элементарных веществ и могут быть использованы для идентификации поверхностных окончаний. Также были выделены различные поверхностные дефекты (вакансия атома или наоборот адатом), которые влияют на электронную структуру. Обнаружено, что на спектрах плотности электронных состояний имеется узкий провал вблизи уровня Ферми на рис. 2, которая незначительно уменьшается при увеличении температуры от

1.4 К до 13.8 К. А при 77К данная особенность в том же промежутке напряжений вообще не наблюдается. То есть полученный результат указывает, что критическая температура находится между 13.8 К и 77 К.



а *б* *в*

Рис. 1. Кристаллическая структура (*а*), кадр с оптического микроскопа (*б*), топография расщепленного CeCo2P2 (*в*)



а *б*

Рис. 2. Сканирующая туннельная спектроскопия (*а*), dZ/dV спектр поверхности расщепленного $CeCo_2P_2$ (*б*)

Литература

1. *Schulz S.* [et al.]. Emerging 2D-Ferromagnetism and Strong Spin-Orbit Coupling at the Surface of Valence-Fluctuating $EuIr_2Si_2$ // npj Quantum Mater. 2019. V. 4(1): 26.
2. *Poelchen* G. [et al.]. Interlayer Coupling of a Two-Dimensional Kondo Lattice with a Ferromagnetic Surface in the Antiferromagnet $CeCo_2P_2$ // ACS Nano. 2022. V. 16(3). P. 3573–3581.

УДК 538.91

Исследование перехода между фазами целочисленного и дробного эффекта Холла

***А. М. Никишин*[1,2], *А. А. Марков*[1,3]**

[1]Российский квантовый центр
[2]НИЯУ Московский инженерно-физический институт
[3]Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Дробные изоляторы Черна [1] — системы, в которых дробный эффект Холла [2] возникает благодаря комбинированному эффекту многочастичного взаимодействия и нетривиальной топологии решеточной системы. В таких системах холловская проводимость принимает дробные значения в атомных единицах: $\sigma_{xy} = C\, e^2/h$, где C — дробное число. Такая ситуация возможна в системах с дробным заполнением зоны, обладающей нетривиальным числом Черна, т. е. такой зоны, что при ее заполнении наблюдается целочисленный эффект Холла. Одна из важнейших особенностей дробного эффекта Холла — его непертурбативность. Может показаться, что подобное состояние может быть получено из основного

состояния невзаимодействующей системы с правильным частичным заполнением зоны и щелью, открытой с помощью внешнего периодического потенциала. Рассмотрим следующую модель:

$$H = \sum_{m,n}\left(-t\sum_{\sigma}\left(C^{+}_{m+1,n\,\sigma}C_{m,n\,\sigma} + C^{+}_{m,n+1\,\sigma}C_{m,n\,\sigma}\,e^{i2\pi m\alpha} + h.c.\right) + U\,n_{m,n\uparrow}\,n_{m,n\downarrow} + V_{m,n}(n_{m,n\uparrow} + n_{m,n\downarrow})\right).$$

Она описывает систему электронов на решетке во внешнем магнитном поле. Здесь α — безразмерный магнитный поток через ячейку, U — отталкивание на узле, а матрица V задает профиль внешней периодической модуляции потенциала. При фиксированном поле возникает несколько зон Ландау. Создадим частичное заполнение нижней зоны, далее внешним потенциалом можно добиться того, что система окажется изолятором. Теперь начнем адиабатически медленно включать взаимодействие, при этом можно ожидать, что система по-прежнему будет оставаться в состоянии изолятора. После выключения модуляции мы можем надеяться прийти к фазе с дробным эффектом Холла.

В силу рассматриваемого дробного заполнения нижнего уровня Ландау, мы исследуем поведение системы в низкоэнергетической области, поэтому в работе рассмотрено численное моделирование описанного перехода между фазами с помощью точной диагонализации системы, спроецированной на низшую зону. Оказывается, что при полном выключении модуляции переход всегда сопровождается схлопыванием щели, что согласуется с тем фактом, что топологически неэквивалентные фазы связаны посредством закрытия энергетической щели.

Следующий шаг в изучении этого вопроса заключается в детальном анализе поведения системы на протяжения всего перехода. Чтобы понять, получается ли состояние с дробным квантованием, необходимо аккуратно проследить изменение функций Грина. Существует известное функциональное выражение для топологического инварианта, описывающего поведение слабовзаимодействующих систем с целочисленным квантованием холловской проводимости в терминах одночастичных функций Грина [3]. В том числе это позволяет изучать эффекты взаимодействия с помощью развитых методов динамического среднего поля [4] и их расширений. В то же время описание систем с дробными топологическими инвариантами — куда более сложный вопрос. Таким образом, интерес представляет изучение дробного эффекта на языке одночастичных функций Грина.

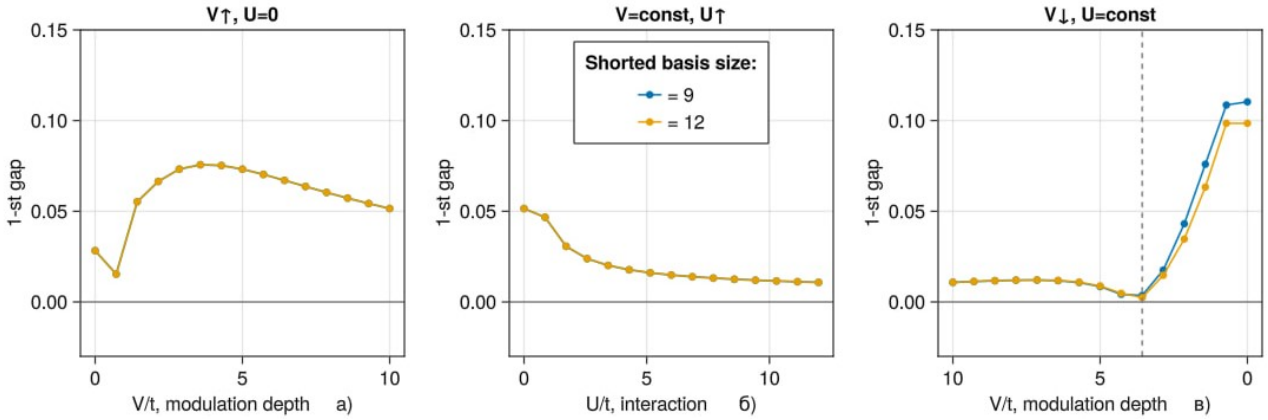


Рис. 1. Эволюция щели над основным уровнем Ландау системы трех фермионов во внешнем магнитном поле в присутствии дополнительной модуляции с удвоенным периодом решетки. Кластер 6x6, магнитный поток через элементарную ячейку ϕ_0 =1/4, V — глубина пучностей модуляции в энергетических единицах, U — энергия хаббардовского отталкивания электронов с разными спинами. Эволюция разделена на 3 этапа: *а* — включение модуляции; б — учет электронного отталкивания при фиксированной модуляции; *в* — выключение модуляции при сохраняющейся величине взаимодействия

Топологические свойства такой системы можно описывать с помощью числа Черна C. В недавней статье [5] с помощью формулы Штреды [6] было получено аналитическое выражение числа Черна многочастичной взаимодействующей системы, имеющей дробное холловское поведение $C = N[G] + \Delta N[G, dG/dB]$, где слагаемое N вносит целочисленный вклад, а ΔN по предположению вносит дробный вклад. В связи с этим представляет большой интерес расчет дробной добавки, соответствующей второму слагаемому, и исследование ее применимости к конечным системам. В частности, интересно проверить, действительно ли оно дает дробный вклад в топологический инвариант в объеме образца. Нужно заметить, что слагаемое ΔN — функционал таких величин, как полевые функции Грина и их производные по магнитному полю, расчет которых является обособленной интересной задачей.

Литература

1. *Sheng D. N.* [et al.]. Fractional quantum Hall effect in the absence of Landau levels // Nature communications. 2011. V. 2(1): 389.
2. *Tsui D. C.*, *Stormer H. L.*, *Gossard A. C.* Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit Phys. Rev. Lett. 1982. V. 48(22). P. 1559–1562.
3. *Ishikawa K.*, *Matsuyama T.* A microscopic theory of the quantum Hall effect // Nuclear Physics B. 1987. V. 280. P. 523–548.
4. *Georges A.* [et al.]. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys. 1996. V. 68(1): 13.
5. *Gavensky L. P., Sachdev S., Goldman N.* Connecting the many-body Chern number to Luttinger's theorem through Stˇreda's formula // Phys. Rev. Lett. 2023. V. 131: 236601.
6. *Streda P.* Theory of quantized Hall conductivity in two dimensions // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1982. V. 15(22): L717.

УДК 538.945, 535.14

Корреляции второго порядка в излучении искусственного сверхпроводникового атома в передающую линию

***В. В. Воскресенский*[1], *А. В. Васенин*[1,2], *А. Ю. Дмитриев*[1], *А. Болгар*[1], *О. В. Астафьев*[1,2]**

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

Корреляционные функции [1] широко используются для изучения квантовых электромагнитных полей. Например, корреляторы второго порядка полезны для описания качества однофотонных источников [2]. Важной особенностью является то, что для микроволнового диапазона, в котором работает изучаемая нами система, до сих пор нет достаточно эффективных однофотонных детекторов, с помощью которых данные функции измеряются в системах оптического диапазона, поэтому мы используем линейные детекторы [3]. Однако у сверхпроводящих квантовых цепей есть преимущество: с помощью них можно создать систему с сильной связью искусственного атома с волноводом, что позволяет легче наблюдать однофотонные процессы.

С помощью корреляторов первого и второго порядков мы исследуем излучение сверхпроводникового кубита трансмона, симметрично связанного с передающей линией, при непрерывной накачке. Измеренные нами корреляторы имеют следующий вид:

$$G^{(1)}(t+\tau,t) = \left\langle S_R^\dagger(t+\tau) S_T(t) \right\rangle, \tag{1}$$

$$G^{(2)}(t+\tau,t) = \left\langle S_R^\dagger(t) S_R^\dagger(t+\tau) S_T(t+\tau) S_T(t) \right\rangle, \tag{2}$$

здесь $\mathrm{S_R(t)}$ и $\mathrm{S_T(t)}$ — отраженный и прошедший сигналы соответственно. Для их получения разработана техника измерений с помощью линейных детекторов и обработки данных в реальном времени на видеокарте. Для практического применения важны стационарные корреляционные функции:

$$\mathrm{g^{(1)}(\tau)} = \lim_{\mathrm{t_0}\to\infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{\mathrm{t_0}} \mathrm{G^{(1)}(t+\tau,t)dt}, \tag{3}$$

$$\mathrm{g^{(2)}(\tau)} = \lim_{\mathrm{t_0}\to\infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{\mathrm{t_0}} \mathrm{G^{(2)}(t+\tau,t)dt}, \tag{4}$$

которые зависят только от времени задержки между сигналами τ. Полученные результаты сравнивались с численными моделями для $\mathrm{g^{(1)}}$ и $\mathrm{g^{(2)}}$. На рис. 1*б* можно наблюдать эффект антигруппировки, характерный для источников одиночных фотонов.

Таким образом, нами было изучено излучение искусственного сверхпроводникового атома: было показано, что излучение данного источника является однофотонным, и поведение корреляционных функций $\mathrm{g^{(1)}}$ и $\mathrm{g^{(2)}}$ сходится с теоретической моделью. Разработанный метод измерения корреляторов с помощью линейных детекторов в СВЧ-диапазоне может служить для исследования фотонной статистики квантовых источников в различных экспериментах.

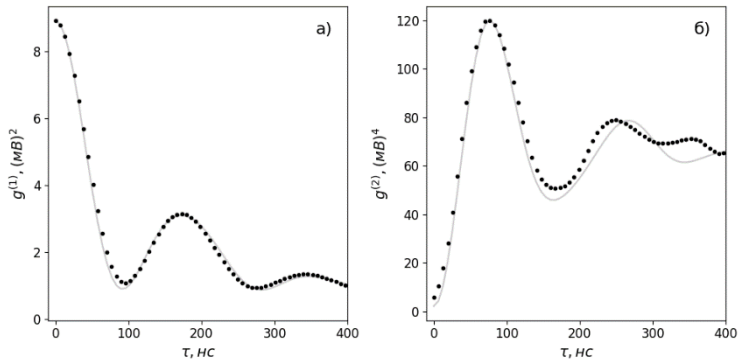


Рис. 1. Стационарные корреляторы: *а* — первого порядка, *б* — второго порядка. Серыми линиями обозначены результаты численного моделирования с одинаковыми параметрами $\Gamma_1 = 3{,}43$ МГц, $\Omega_R = 5{,}40$ МГц, полученными подгонкой. Черными точками — экспериментальные данные, соответствующие формулам (3) и (4)

Литература

1. *Glauber R. J.* Photon Correlations // Physical Review Letters. 1963. V. 10(3). P. 84–86.
2. *Peng Z. H.* [et al.] Tuneable on-demand single-photon source in the microwave range // Nature Communications. 2016. V.7(1): 12588. DOI: 10.1038/ncomms12588/
3. *Da Silva M. P.* [et al.] Schemes for the observation of photon correlation functions in circuit QED with linear detectors // Physical Review A. 2010. V. 82(4): 043804. DOI: 10.1103/PhysRevA.82.043804.

УДК 538.945.6

Джозефсоновский диодный эффект в СКВИДе с наномостиком, имеющим многозначную ток-фазовую характеристику

***Г. С. Селезнев*[1,2], *Я. В. Фоминов*[1,2]**

[1]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Диодный эффект в различных электрических системах очень интересен как с научной, так и с прикладной точек зрения и находит множество технологических применений в виде фильтров, преобразователей, выпрямителей тока и т. д [1].

В настоящее время его проявление в сверхпроводящих системах, называемое сверхпроводящим диодным эффектом (СДЭ), активно изучается как теоретически, так и экспериментально [2,3]. В частности, он может наблюдаться в системах, состоящих из нескольких джозефсоновских контактов [4,5]. В этом случае этот эффект называется джозефсоновским диодным эффектом (ДДЭ). Проявляется он в различии поведений системы при приложении к ней положительного $eV > 0$ и отрицательного $eV < 0$ напряжений. Это различие может заключаться в асимметрии вольт-амперной характеристики (ВАХ) контакта, ступенек Шапиро и т. д.

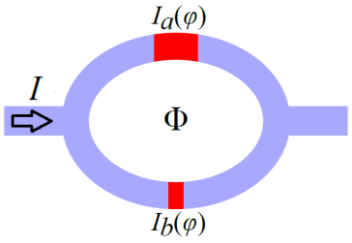


Рис. 1. Асимметричный СКВИД с джозефсоновскими контактами в рукавах, имеющими разные ток-фазовые характеристики $I_{SNS}(\varphi)$ и $I_{NB}(\varphi)$

Данная работа посвящена теоретическому объяснению ДДЭ в недавнем эксперименте группы В. Столярова. Рассматривается СКВИД, состоящий из SNS контакта, имеющего стандартное синусоидальное ток-фазовое соотношение $I_{SNS}(\varphi) = I_{sns}\sin\varphi$, и наномостика, ток-фазовая характеристика которого

$I_{NB}(\varphi)$ является многозначной функцией фазы [6]. К системе также приложено магнитное поле, создающее поток Ф через кольцо интерферометра.

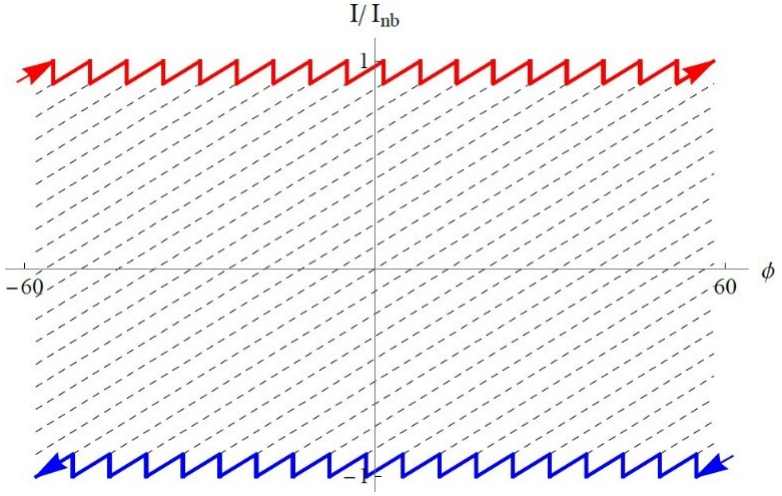


Рис. 2. Многозначная ток-фазовая характеристика наномостика. Штрихованными линиями показаны различные линейные ветки ток-фазовой характеристики в стационарном режиме. Красные и синие «пилы» описывают эффективное ток-фазовое соотношение в нестационарном режиме при положительном и отрицательном направлениях движения. Направление движения зависит от знака напряжения на контактах

В такой системе в нестационарном режиме (при конечном напряжении на контактах) эффективная ток-фазовая характеристика всего СКВИДа оказывается асимметричной. В частности, наблюдается асимметрия амплитуды первой джозефсоновской гармоники. Это приводит к тому, что при приложении к системе внешнего переменного тока высота и форма возникающих ступенек Шапиро начинает зависеть от знака напряжения на контактах, что является ярким проявлением ДДЭ в рассматриваемой системе.

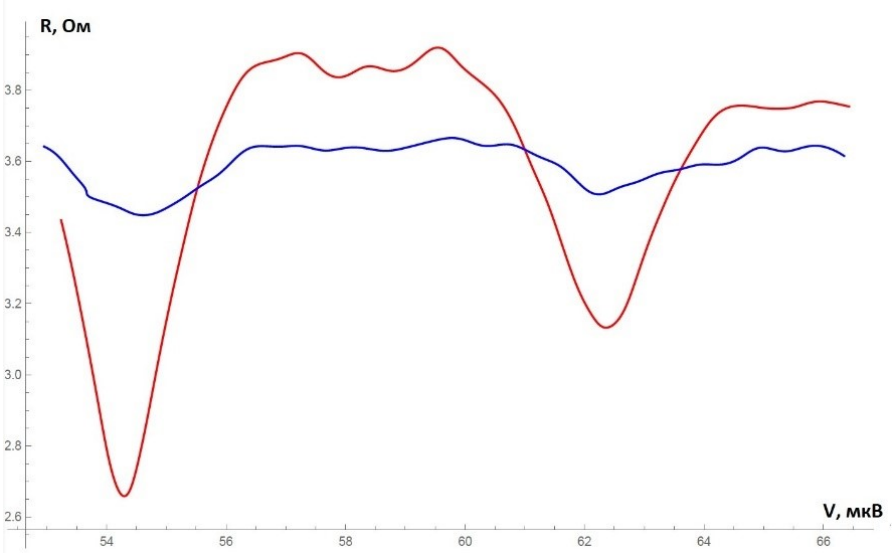


Рис. 3. Асимметрия ступенек Шапиро в СКВИДе с наномостиком

Литература

1. *Malvino A.* [et al.]. Electronic Principles // NewYork: McGrawHill, 2020.
2. *Yasuda K.* [et al.]. Nonreciprocal charge transport at topological insulator/superconductor interface // Nat. Commun. 2019. V. 10:2734.
3. *Ando F.* [et al.]. Observation of superconducting diode effect // Nature. 2020. V. 584. P. 373–376.
4. *Fominov Ya. V.* [et al.] Asymmetric higher-harmonic SQUID as a Josephson diode // Phys. Rev. B. 2022. V. 106: 134514.
5. *Gupta M.* [et al.]. Gate-tunable superconducting diode effect in a three-terminal Josephson device // Nat. Commun. 2023. V. 14: 3078.
6. *Bezryadin A.* [et al.]. Fractional order Shapiro steps in superconducting nanowires // Applied Physics Letters. 2008. V. 93: 192505.

УДК 538.911, 538.913

Локализованные состояния в направленных случайных сетях

***Д. С. Кочергин*[1,2], *В. С. Тиселько*[2,3], *А. А. Онучин*[2,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Лаборатория сложных сетей, Центр нейрофизики и нейроморфных технологий
[3]Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН
[4]Сколковский институт науки и технологий

В работе показано наличие одночастичной локализации бесспинового фермиона на направленных случайных сетях как на левых и правых собственных векторах, так и на их биортогональном произведении. Для направленных сетей гамильтониан системы неэрмитов, а левые и правые волновые вектора не сопряжены комплексно. Известно, что в общем случае для неэрмитовых матриц возможно наличие особых точек, в которых матрица будет недиагонализуема и может принять вид матрицы Жордана [1]. Кроме того, для неэрмитовых одномерных систем существует неэрмитовый скин-эффект — локализация левых и правых векторов на противоположных границах решетки [1–3].

Для того, чтобы аналитически показать возможность локализации на направленных случайных графах, рассматривается граф с тремя блоками A, B и C, ребра внутри блоков направлены случайным образов. Между блоками же ребра имеют четкую направленность с весом $1-\epsilon$ от блока A к B и от B к C, а противоположно к ним направленные ребра имеют вес ϵ. Уравнение на правые собственные вектора принимает вид:

$$\begin{pmatrix} A & y & 0 \\ x & B & z \\ 0 & w & C \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi_A^R \\ \phi_B^R \\ \phi_C^R \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \phi_A^R \\ \phi_B^R \\ \phi_C^R \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где ненулевые элементы y и z равны $1-\epsilon$, а ненулевые элементы x и w равны ϵ. При $\epsilon = 0$ матрица становиться недиагонализуема. При этом правый собственный вектор для собственного значения из A принимает ненулевые значения только на блоке A, а для собственного значения из блока C левый вектор локализован только на блоке C. Если же рассмотреть произведение левого и правого векторов при ненулевых ϵ в окрестности $\epsilon = 0$ для собственного значения, которое есть как в блоках A, так в блоке C и выписать только зависимость от порядка малости, то получается следующие формулы

$$\phi_{A,C}^L \phi_{A,C}^R \sim \frac{\mathcal{O}(\epsilon^2)}{\mathcal{O}(\epsilon^{k_{A,C}/l})+\mathcal{O}(\epsilon)}, \tag{2}$$

$$\phi_B^L \phi_B^R \sim \left(\frac{\mathcal{O}(\epsilon^{k_A/l+1})}{\mathcal{O}(\epsilon^{k_A/l})+\mathcal{O}(\epsilon)}\right)\left(\frac{\mathcal{O}(\epsilon^{k_C/l+1})}{\mathcal{O}(\epsilon^{k_C/l})+\mathcal{O}(\epsilon)}\right), \tag{3}$$

где $k_{A,C}$ — степени вырождения, соответствующего собственному значению на блоках, l — размер соответствующего блока Жордана в особой точке. Из порядков малости следует, что произведение $\phi_B^L \phi_B^R$ может быть подавлено по сравнению с $\phi_{A,C}^L \phi_{A,C}^R$.

Была введена двух параметрическая модель для численного моделирования направленных случайных графов. Первый параметр, двунаправленность, отвечает за отношение числа двунаправленных связей к сумме двунаправленных и однонаправленных связей, второй параметр отвечает за асимметрию на двунаправленном ребре. Алгоритм создания направленного графа с параметрами r и p следующий. Связи ненаправленного графа заменяются с вероятностью r с ненаправленного ребра на два противоположно направленных с весами p и $1-p$, приоритетное направление тоже выбирается случайным образом. В противном случае с вероятностью $1-r$ ненаправленное ребро заменяется на одно направленное в случайном направлении с весом 1. Таким образом, общая пропускная способность канала связи между соединенными узлами постоянна и равна 1. Если $r = 0$ или $p = 0$ или $p = 1$, то граф становится ориентированным направленным графом. Если $r = 1$ и $p = 0.5$, то граф эквивалентен неориентированному, где все ребра имеют веса, равные 0.5. Для того чтобы не получить недиагонализуемую матрицы, к однонаправленным ребрам ребра обратной связи с малым весом ϵ и изменяем вес исходного ребра на $1-\epsilon$.

В численном моделирования исследовалась фрактальная размерность $D_2 = -\log_2 IPR / \log_2 N$, где N — число вершин в графе (n — номер вершины), IPR — обратный коэффициент участия., для левого и правого векторов (S) и для их биортогонального произведения (B) он рассчитывается по формулам:

$$IPR^S = \frac{\sum_n |\phi^S(n)|^4}{\left(\sum_n |\phi^S(n)|^2\right)^2}, IPR^B = \frac{\sum_n |\phi^L(n)\phi^R(n)|^2}{\left(\sum_n |\phi^L(n)\phi^R(n)|\right)^2}. \quad (4)$$

На рис. 1 представлены результаты для модифицированного случайного регулярного графа со степенью вершин $d = 4$, $N = 1024$, $r = 0.1$, $p = 0.5$. Синие линии показывают, что в системе присутствуют локализованные левые и правые состояния ($D_2 = 0$). Что наиболее важно: биортогональная фрактальная размерность тоже локализована, что влияет на транспортные свойства системы. Границу локализации при $p = 0.5$ равна $r = 1 - 2/N^{1/d}$. Также показано (красные линия) значительное более активное появление биортогональной локализации при наличие диагонального беспорядка Андерсона с небольшой амплитудой $W = 5$, связанное с нарушением резонансов.

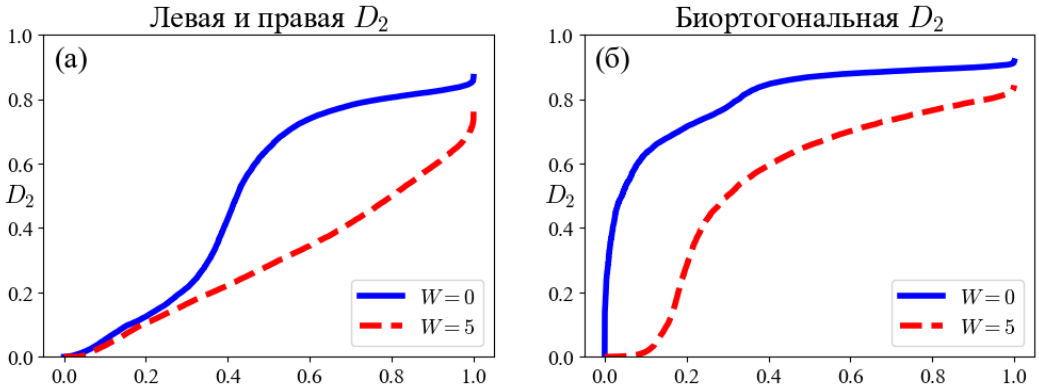


Рис. 1. Фрактальная размерность для левых и правых состояний (*а*); произведения левого и правого состояний, отсортированная в порядке возрастания для модифицированного случайного регулярного графа $d = 4$, $N = 1024$, $r = 0.1$, $p = 0.5$ (*б*). Синие линии показывает состояний для матрицы смежности, красные для матрицы смежности возмущенной диагональный беспорядком Андерсона с амплитудой $W = 5$

Литература

1. *Bergholtz E. J., Budich J. C., Kunst F. K.* Exceptional topology of non-hermitian systems // Rev. Mod. Phys. 2021. V. 93(1): 015005.
2. *Hatano N., Nelson D. R.* Non-hermitian delocalizetion and eigenfunctions // Phys. Rev. B. 1998. V. 58(13). P. 8384–8390.
3. *Yao S., Wang Z.* Edge states and topological invariants of non-hermitian systems // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121(8): 086803.

УДК 538.935, 538.945

Исследование транспортных свойств Джозефсоновских SN/FS наноструктур со спиновой инжекцией

***Д. А. Клишев*[1,2,3], *И. С. Лакунов*[2], *Т. Е. Голикова*[2], *В. В. Рязанов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт физики твердого тела РАН
[3]Сколковский институт науки и технологий

Одним из способов создать неравновесное распределение спинов в сверхпроводнике является использование ферромагнитного электрода в качестве источника тока со спиновой поляризацией. Существует трудность в использовании ферромагнетиков со сверхпроводниками из-за сильного подавления сверхпроводимости даже в случае сплавов с разбавленным ферромагнетиком, однако, как было показано в [1, 2] можно использовать комбинации слоев с нормальным металлом N/F. В данной работе экспериментально демонстрируется влияние спинового инжекционного тока на транспортные свойства наномасштабных SN/FS Джозефсоновских структур с инжектором.

Образцы были изготовлены с использованием электронной литографии и теневого напыления. Изображение одной из исследуемых структур, полученное сканирующим электронным микроскопом, со схемой измерений показано на рис. 1. Сначала на окисленной кремниевой подложке был сформирован тонкий (10-15

нм) инжекционный электрод, изготовленный из ферромагнитного (F) железа. Затем слой меди (N) толщиной 30 нм был нанесен под вторым углом для образования мостика, перпендикулярного железному электроду. Наконец, толстый (100 нм) слой сверхпроводящего (S) алюминия был нанесен для формирования сверхпроводящих берегов и электрических контактов инжекционным электродом под третьим углом. Расстояние между сверхпроводящими слоями составляло d=200 нм, ширина полосы железа w_F = 160 нм, ширина полосы меди w_N =200 нм. Размеры ферромагнитного инжектора были выбраны таким образом, чтобы получить однодоменное состояние полоски Fe с намагниченностью, направленной параллельно длинной стороне.

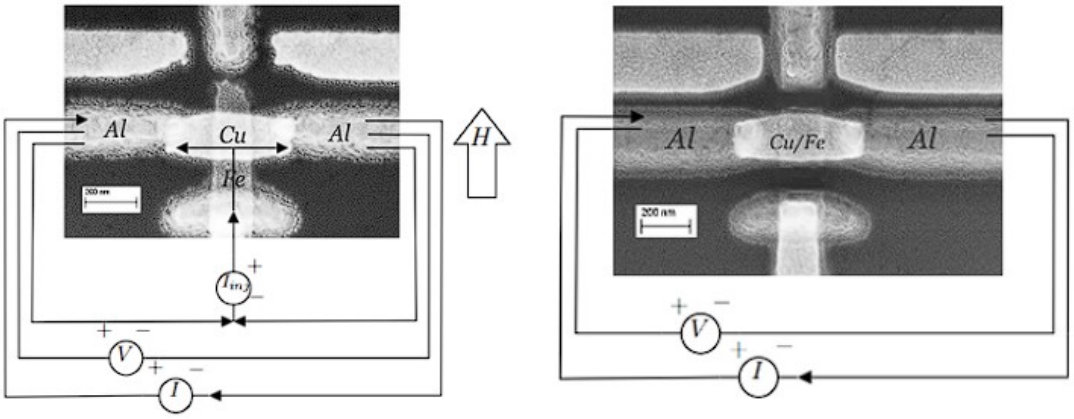


Рис. 1. SEM изображения исследуемых образцов с измерительными схемами и направлением прикладываемого магнитного поля. *Слева*: с ферромагнитным инжектором в слабую связь Джозефсоновского перехода; *справа*: с N/F бислоем в качестве слабой связи

Транспортные измерения проводились в экранированном криостате ^{3}He при температурах до 0.3 К. Магнитное поле разворачивалось в плоскости образца, параллельно полоске Fe. Вольт-амперные характеристики и дифференциальное сопротивление были измерены по четырехточечной схеме и при наличии инжекционного тока через железный электрод, как показано на рис. 1.

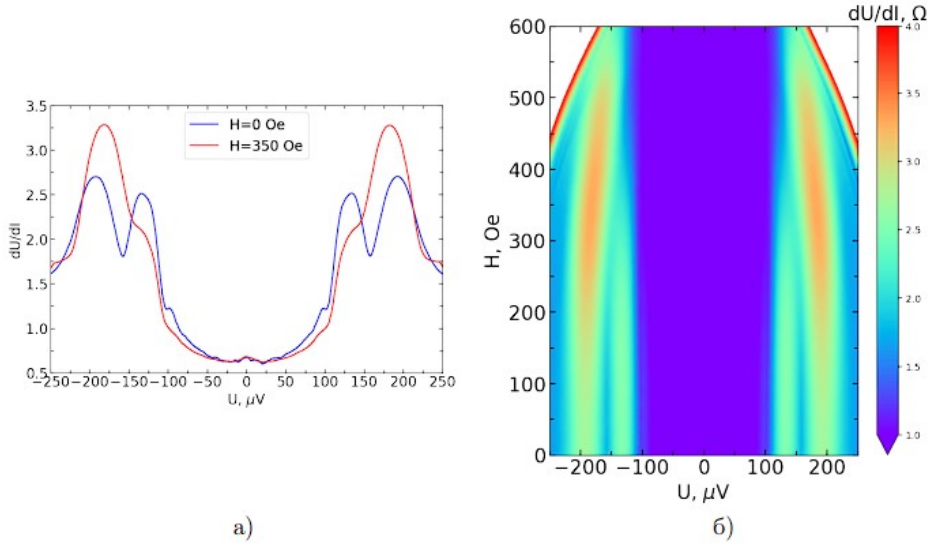


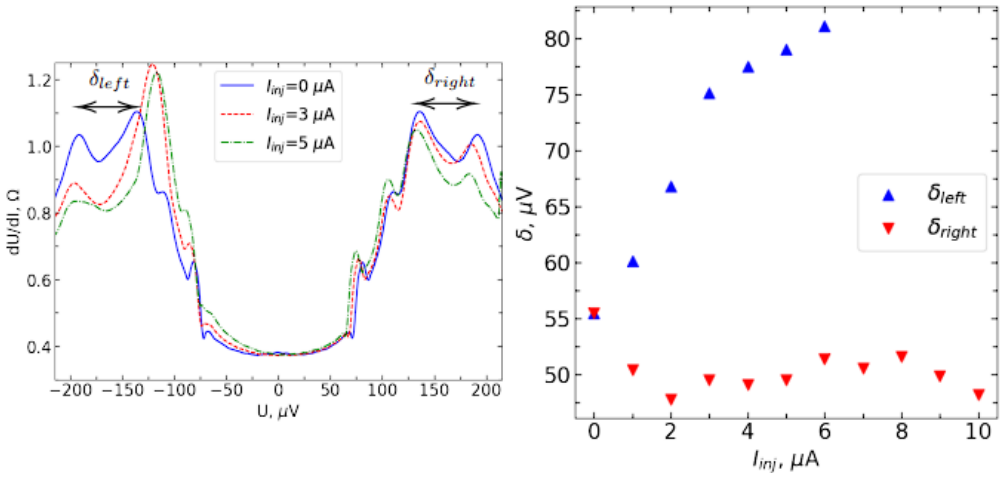
Рис. 2. Зависимости dU/dI(U) от приложенного магнитного поля при T = 0.4 К: *а* — зависимости для двух значений поля, при значении около 330 Э расщепление исчезает; *б* — трехмерное представление для измеренного диапазона

Зависимости дифференциального сопротивления dU/dI от напряжения U диффузионной структуры SN/FS в зависимости поля представлены на рис. 2. Наблюдается расщепленная особенность дифференциального сопротивления при напряжении Δ/e (где Δ = 180 мкэВ — сверхпроводящая щель алюминия), которая связана с многократным Андреевским отражением, рассмотренным для диффузионного SNS-мостика промежуточной длины [3].

Величина расщепления обозначена δ. С ростом температуры расщепление практически не менялось. При увеличении приложенного поля расстояние между пиками немного уменьшается, но вблизи величины поля около 330 Э амплитуда одного из пиков уменьшается настолько, что расщепление исчезает. Величина этого «критического» поля близка к коэрцитивному полю для данного образца железа,

равному примерно 300-400 Э, хотя точное магнитное состояние такого наномасштабного ферромагнитного элемента неизвестно. Таким образом, наблюдалось эффективное уменьшение индуцированного обменного расщепления в N-слое при приложении внешнего магнитного поля.

В эксперименте также исследовались вольт-амперные характеристики и зависимости дифференциального сопротивления от напряжения для SN/FS структуры с ферромагнитным инжектором при температуре T = 0.4 К и различных токах инжекции. Результат показан на рис. 3*а*. Наблюдалось увеличение расщепления δ с увеличением тока I_{inj} (рис. 3*б*) измеренного диапазона. Расщепление значительно (на 50%) увеличивается от исходного значения без тока инжекции до максимальных значений I_{inj}. По-видимому, наблюдаемый эффект связан с процессом инжекции спина в N-слой перехода и индуцированной спиновой поляризаций (λ_{SF} = 1 мкм при нанометровых размерах). Удельное сопротивление железной пленки ρ_F = 70 мкОм×см намного больше удельного сопротивления медной пленки ρ_N = 4.5 мкОм×см, основная часть тока протекает через N-слой.



а *б*

Рис. 3. Результаты измерений со спиновой инжекцией: *а* — зависимости $dU/dI(U)$ для нескольких токов инжекции. Стрелками обозначено изучаемое расщепление; *б* — зависимость величины расщепления щелевой особенности — пики слева с ростом инжекции раздвигаются, в то время как правые практически не меняются. Несимметричность объясняется разными сопротивлениями на интерфейсах из-за разных интерфейсов границ

Литература

1. *Karminskaya T. Yu.* [et al.]. Josephson effect in superconductor/ferromagnet structures with a complex weak-link region //Phys. Rev. B. 2010. V. 81(21): 214518.
2. *Golikova T. E.* [et al.]. Double proximity effect in hybrid planar superconductor-(normal metal/ferromagnet)-superconductor structures // Phys. Rev. B. 2012. V. 86(6): 064416.
3. *Cuevas J. C.* [et al.]. Proximity effect and multiple Andreev reflections in diffusive superconductor–normal-metal–superconductor junctions // Phys. Rev. B. 2006. V. 73(18): 184505.

УДК 538.945,538.955

Нейтронные и синхротронные исследования наноструктур со сверхпроводящими свойствами и сложным магнитным упорядочением

***В. Д. Жакетов*[1,2] *Д. А. Норов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований
[3]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Для систем пониженной размерности характерны нетривиальные явления, которые не наблюдаются в объемных материалах. К таковым системам относятся и слоистые двумерные структуры. Особый интерес представляют двумерные низкоразмерные структуры со сверхпроводящими (S) и ферромагнитными (F) свойствами, в которых реализуется взаимодействие двух антагонистичных друг другу параметров порядка [1]. Перспективными системами для изучения эффектов близости являются S/F-гетероструктуры из ниобия и

редкоземельных (RE) металлов [2]. В первую очередь отмечается высокая прозрачность границы раздела S/F для таких систем RE/Nb, как Gd/Nb, что упрощает проникновение сверхпроводящих корреляций в F-слои. Во-вторых, редкоземельные металлы характеризуются низкими значениями точки Кюри, что сближает энергии обоих взаимодействий и облегчает реализацию эффектов близости. В докладе приводятся результаты исследования электромагнитного эффекта близости в трехслойных структурах Nb(100нм)/Gd(d_f)/V(70 нм). Обнаружено изменение магнитной структуры под влиянием сверхпроводимости на уровне 4-10 %, что, по-видимому, обусловлено электромагнитным эффектом близости [3]. С другой стороны, некоторые редкоземельные элементы, такие как Dy и Ho, являются редкоземельными антиферромагнетиками с геликоидальной структурой [4], позволяющей генерировать дальнодействующую триплетную сверхпроводимость. Для слоистой гетероструктуры Al_2O_3/Nb(40 нм)/[Dy(6 нм)/Ho(6 нм)]$_{34}$/Nb(10 нм) получено, что при температуре ниже сверхпроводящего перехода магнитное состояние гелимагнетика подстраивалось под сверхпроводимость.

Одним из эффективных методов исследования магнетизма является рефлектометрия поляризованных нейтронов, позволяющая получить изотопные и магнитные профили по глубине с нанометровым разрешением. Рефлектометр поляризованных нейтронов РЕМУР, располагающийся на 8м канале импульсного реактора ИБР-2 (Дубна), является одним из наиболее светосильных рефлектометров в мире с потоком нейтронов на образце $\Phi = 3 \cdot 10^5$ н $\cdot$ с$^{-1} \cdot$ см$^{-2}$. Данный рефлектометр является времяпролетным с рабочим диапазоном длины волны нейтрона ~1-15 Å. Особенностью данного рефлектометра является то, что на нем реализована мода регистрации вторичного излучения: заряженных частиц, гамма-квантов, а также нейтронов с переворотом спина. Регистрация вторичного излучения различного типа позволяет определять пространственный профиль отдельных изотопов [5]. Рефлектометрия поляризованных нейтронов позволяет определить профиль намагниченности слоистой структуры с разрешением 1 нм и менее. Высокий уровень интенсивности на синхротронах позволяет анализировать структуру кластерных образований с характерным размером 1 нм и менее с помощью малоуглового рассеяния излучения в скользящей геометрии.

Работа выполнена при поддержки грата РНФ № 22-72-00116.

Литература

1. *Zhaketov V. D.* [et al.]. Magnetic and Superconducting Properties of the Heterogeneous Layered Structures V/Fe0.7V0.3/V/Fe0.7V0.3/Nb and Nb/Ni0.65(0.81)Cu0.35(0.19) // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2019. V. 129. P. 258–276.
2. *Khaydukov Yu.N.* [et al.]. Magnetic proximity effect in Nb/Gd superlattices seen by neutron reflectometry // Physical Review B. 2019. V. 99: 140503.
3. *Mironov S.* [et al.]. Electromagnetic proximity effect in planar superconductor-ferromagnet structures // Appl. Phys. Lett. 2018. V. 113: 022601.
4. *Devyaterikov D. I.* [et al.]. Study of Helimagnetism in Dy/Ho Superlattice by Neutron Reflectometry // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. V. 16. P. 839–842.
5. *Aksenov V. L.* [et al.]. Neutron Reflectometry with Detection of the Secondary Radiation: Particle–Wave Method of Determining the Nanoscale Isotope Density Distributions. 2023. V. 54. P. 756–775.

УДК 538.945.5

Протекание сверхтекучего тока в неоднородных сверхпроводниках

***О. Б. Зуев*[1,2], *М. А Скворцов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

Одной из областей практического применения сверхпроводимости, возникшей в последние десятилетия, является детектирование микроволнового излучения [1]. В силу технологических требований используемые сверхпроводники являются не просто грязными (параметр $T_c\tau/\hbar \ll 1$), но сильно грязными, находящимися в окрестности порога локализации (параметр $E_F\tau/\hbar$ приближается к 1) [2]. Для таких достаточно сильно неупорядоченных материалов становится существенной неоднородность сверхпроводящего состояния [3-5]. В данной работе мы преследуем цель описать влияние неоднородности на протекание сверхтекучего тока в такого рода пленках. Неоднородность мы рассматриваем как замороженные гауссовы флуктуации локальной температуры перехода.

Параметр порядка Δ в сверхпроводнике вблизи критической температуры T_c описывается уравнением Гинзбурга–Ландау (ГЛ). Для неупорядоченного сверхпроводника оно принимает вид

$$-\xi_0^2\left(\nabla + i\frac{2e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)^2\Delta - \big(\alpha + \alpha_1(\boldsymbol{r})\big)\Delta + \beta|\Delta|^2\Delta = 0 \quad (1)$$

В грязном пределе коэффициенты имеют вид: $\alpha = \nu(T_c - T)/T_c$, $\beta = \nu 7\zeta(3)/8\pi^2 T_c^2$, $\xi_0^2 = \nu\pi D\hbar/8T_c$, где D — коэффициент диффузии. Флуктуации локальной температуры перехода связаны с $\alpha_1(\boldsymbol{r})$ следующим образом: $\alpha_1(\boldsymbol{r}) = \alpha\,\delta T_c(\boldsymbol{r})/T_c$. Влиянием неоднородности на два другие коэффициента мы пренебрегаем, так как в теории ГЛ именно α обращается в нуль в точке фазового перехода. Случайное поле $\alpha_1(\boldsymbol{r})$ предполагается гауссовым с коррелятором $\langle\alpha_1(\boldsymbol{r})\alpha_1(\boldsymbol{r}')\rangle = f_\alpha(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, причем масштаб r_c корреляционной функции $f_\alpha(\boldsymbol{r})$ будем считать много меньшим как сверхпроводящей длины когерентности $\xi = \frac{\xi_0}{\sqrt{\alpha}}$, так и толщины пленки d. Мы будем интересоваться статистическими свойствами сверхтока, возникающего при приложении разности фаз к образцу. Поскольку в неоднородном сверхпроводнике фаза параметра локально подстраивается под неоднородности, мы будем вычислять статистические свойства так в зависимости от среднего градиента фазы $\boldsymbol{A} = \frac{\hbar c}{2e}\langle\nabla\varphi\rangle$. Мы предполагаем, что внешнего магнитного поля нет, а также пренебрегаем индуцированным магнитным полем. Последнее законно, если пленка достаточно узкая (ширина $w \ll \Lambda^2/d$, где Λ — глубина проникновения сверхпроводника).

Для решения уравнения (1) используется теория возмущений по величине неоднородности $\alpha_1(\boldsymbol{r})$. При ее построении необходимо учесть, что, помимо возникновения пространственного распределения $\Delta(\boldsymbol{r})$, неоднородность приводит к изменению критической температуры T_c. В дальнейшем предполагается, что T_c уже перенормирована соответствующим образом. Ключевым объектом теории является флуктуационный пропагатор $L(\boldsymbol{r})$, играющий роль функции Грина для поля Δ. В импульсном пространстве он задается соотношением (везде далее множитель $2e/\hbar c$ включен в определение $\boldsymbol{A}$):

$$L^{-1}(\boldsymbol{q}) = \xi_0^2(\boldsymbol{q} + \hat{\sigma}_z\boldsymbol{A})^2 - \alpha + 2\beta\Delta_0^2 + \beta\Delta_0^2\hat{\sigma}_x, \quad (2)$$

где $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули во вспомогательном пространстве (Δ_1, Δ_1^*), а $\Delta_0 = \frac{\alpha}{\beta}(1-\xi^2A^2)$. Через $L(\boldsymbol{q})$ выражается первая поправка $\Delta_1(\boldsymbol{q})$ к значению Δ_0, вызванная неоднородностью:

$$\begin{pmatrix}\Delta_1(\boldsymbol{q})\\ \Delta_1^*(\boldsymbol{q})\end{pmatrix} = \Delta_0\,L(\boldsymbol{q})\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\alpha_1(\boldsymbol{q}). \quad (3)$$

В силу того, что в присутствии сверхтока амплитудные и фазовые степени свободы оказываются запутанными (последний член в формуле (2)), отклик модуля параметра порядка на неоднородность оказывается дальнодействующим, убывая как $1/r^2$ в двумерном и как $1/r^3$ в трехмерном пространстве).

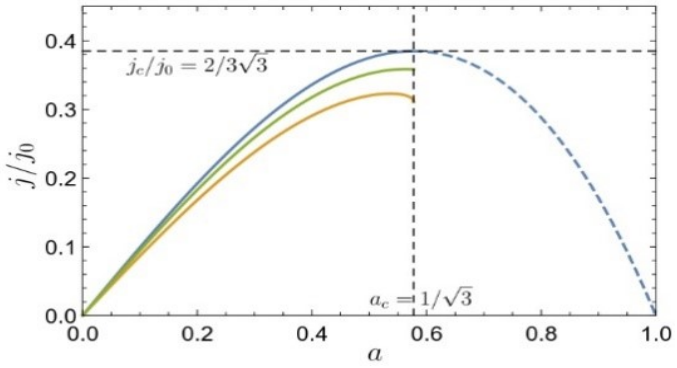


Рис. 1. Зависимость среднего сверхтекучего тока от прикладываемого к краям пленки среднего градиента фаз $a = \xi A$ в отсутствие неоднородности (синяя кривая) и при наличии неоднородности в 3D с $\alpha_{3D}^*/\alpha = 0.01$ (оранжевая кривая) и в 2D с $\alpha_{2D}^*/\alpha = 0.01$ (зеленая кривая). Критический ток всегда сдвигается вниз

Для вычисления среднего тока требуется усреднить его локальное выражение по неоднородностям:

$$\langle j\rangle/\eta = A\langle|\Delta|^2\rangle + \frac{1}{2i}\langle\Delta_1^*\nabla\Delta_1 - \Delta_1\nabla\Delta_1^*\rangle, \quad (4)$$

где $\eta = 4e\nu\xi_0^2/\hbar$. Используя (3) и усредняя по неоднородностям, получаем выражение для среднего тока в виде интеграла от компонент флуктуационного пропагатора. В зависимости от размерности неоднородность характеризуется безразмерным параметром $\alpha_{3D}^*/\alpha = \left(\frac{3f_\alpha(0)}{2^{5/2}\pi\xi_0^3}\right)^2$ в 3D ($d \gg \xi$) и $\alpha_{2D}^*/\alpha = \frac{f_\alpha(0)}{4\pi\xi_0^2}$ в 2D ($d \ll \xi$). Для среднего тока получаем:

$$\langle j\rangle/j_0 = (1-a^2)a + \sqrt{\frac{\alpha^*_{3D}}{\alpha}}\left(\frac{\left(1-3a^2\right)^{3/2}}{6a} - \frac{\left(1-a^2\right)\left(1+3a^2\right)\arcsin\sqrt{\frac{2a^2}{1-a^2}}}{6\sqrt{2}a^2}\right), \quad (5)$$

$$\langle j\rangle/j_0 = (1-a^2)a - \frac{\alpha^*_{2D}}{\alpha} ln\left(\frac{\alpha}{\alpha^*_{2D}}\right)a, \quad (6)$$

где $a = \xi A$, $j_0 = \frac{\eta\alpha^{3/2}}{\xi_0\beta}$. В отсутствие неоднородности ($\alpha^*_{3D} = 0$ или $\alpha^*_{2D} = 0$) получаем известный результат $j = j_0(1-a^2)a$. Формулы (5), (6) дают значение среднего тока как функцию среднего градиента фазы $\boldsymbol{A} = \frac{\hbar c}{2e}\langle\nabla\varphi\rangle$ в низшем порядке по величине неоднородности. Критический ток (максимальный ток, который может протекать через сверхпроводник) всегда сдвигается вниз в присутствие неоднородности. На рис. 1 представлена зависимость тока от среднего градиента фазы при наличии и в отсутствие неоднородности в 3D и 2D.

Литература

1. *Semenov A. D., Goltsman G. N., Korneev A. A*. Quantum detection by current carrying superconducting film // Physica C: Superconductivity 2001. V. 351(4). P. 349–356.
2. *Sacépé B., Feigel'man M. V., Klapwijk T. M.* Quantum breakdown of superconductivity in low-dimensional materials // Nature Physics 2020. V. 16(7). P. 734–746.
3. *Ghosal A., Randeria M., Trivedi N.* Inhomogeneous pairing in highly disordered s-wave superconductors // Phys. Rev. B 2001. V. 65(1): e014501.
4. *Skvortsov M. A., Feigel'man M. V.* Superconductivity in Disordered Thin Films: Giant Mesoscopic Fluctuations // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95(5): e057002.
5. *Sacépé B.* [et al.]. Disorder-Induced Inhomogeneities of the Superconducting State Close to the Superconductor-Insulator Transition // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101(15): e157006.

УДК 530.135, 535.1

Эффекты волнового смешения в каскадных системах сверхпроводниковых кубитов

***Т. Р. Сабиров*[1], *А. Ю. Дмитриев*[1], *С. А. Гунин*[1,2], *А. В. Васенин*[1,2], *О. В. Астафьев*[1,2]**

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

В настоящей работе экспериментально исследован нелинейный квантово-оптический эффект, — волновое смешение распространяющихся волновых пакетов (антигруппированного и когерентного сигнала) в каскадной системе сверхпроводниковых атомов — кубитов.

В качестве экспериментальной платформы использованы кубиты-трансмоны, взаимодействующие с волноводом в режиме сильной связи, что позволяет исследовать рассеяние в каскадной системе на уровне одиночных квантов электромагнитного излучения. Доказано, что при помощи волнового смешения можно получить информацию о фотонной статистике рассеянного поля, что представляет большой интерес для области квантовых коммуникаций [1].

Каскадная система сверхпроводниковых кубитов устроена следующим образом: СВЧ-сигнал возбуждает источник, далее волновой пакет после спонтанной эмиссии в излучательную линию распространяется через криогенный циркулятор к атому-рассеивателю, на который через отдельный канал при помощи направленного ответвителя подается непрерывный СВЧ-сигнал. (За счет наличия криогенного СВЧ-циркулятора сигнал распространяется только от кубита-источника к пробному кубиту.)

Экспериментально получены тепловые карты обсуждаемого эффекта.

Экспериментальные данные согласуются с численным расчетом, основанным на теоретической модели, полученной с использованием теории открытых квантовых систем [2, 3].

Литература

1. *Dmitriev A. Yu* [et al.]. Quantum wave mixing and visualisation of coherent and superposed photonic states in a waveguide // Nat. Commun. 2017. V. 8: 1352.

2. *Pogosov W. V., Dmitriev A. Yu., Astafiev O. V.* Effects of photon statistics in wave mixing on a single qubit // Phys. Rev. A. 2021. V. 104: 023703.
3. *Gardiner C. W., Parkins A. S.* Driving atoms with light of arbitrary statistics // Phys. Rev. A 1994. V. 50: 1792.

УДК 538.945

Акустический лазер на основе искусственного атома, связанного с фононным кристаллом

***П. Ю. Шлыков*[1], *Ш. В. Сандуляну*[1,2], *А. Болгар*[1,3], *О. В. Астафьев*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Университет науки и технологий МИСиС
[3]Сколковский институт науки и технологий

Квантовая акустооптика является новой и активно развивающейся областью исследований, содержащей большое количество физических эффектов [1, 2]. В основном интерес вызван скоростью распространения акустических волн в среде, будучи на несколько порядков ниже скорости распространения электромагнитных сигналов в подобных системах. Для дальнейших экспериментов нами был предложен и изготовлен акустический лазер, который представляет из себя искусственный атом, связанный с двумерным фононным кристаллом. Принципиальная схема и оптическое изображение образца представлены на рис. 1.

В такой схеме мы рассматриваем 3 первых уровня сверхпроводникового кубита, частота перехода между 1 и 2 уровнями близка к частоте акустического резонатора, а остальные переходы сильно отличаются по частоте, что позволяет считать связанными только основной переход акустического резонатора и первый переход искусственного атома. Подбирая критические токи Джозефсоновских переходов и емкости связей, можно добиться лазерного эффекта в фононном кристалле при накачке искусственного атома на частоте перехода 1–3.

Предварительные симуляции позволили понять примерную область параметров для наблюдения эффекта, в соответствии с чем был изготовлен образец: фононный кристалл, состоящий из двух Брэгговских зеркал и двух встречно-штыревых преобразователей (один отвечает за связь акустического резонатора со сверхпроводящим потоковым кубитом, а второй — за связь с антенной) и сверхпроводящий потоковый кубит, состоящий из двух колец с Джозефсоновскими контактами, связанный с дополнительной линией через емкость.

В эксперименте удалось пронаблюдать лазерный эффект по сужению линии излучения акустического резонатора относительно его естественной ширины (рис. 2). К тому же наблюдалось исчезновение антикроссинга у резонатора на отражение при включенной накачке (рис. 3.). Это поведение совпало с полученными в ходе симуляций данными.

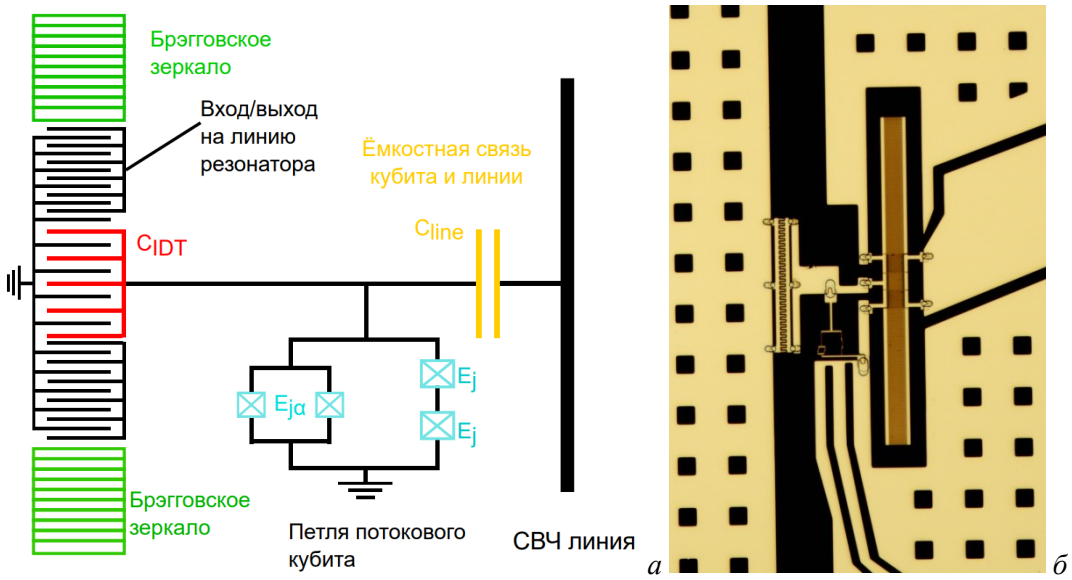


Рис. 1. Концептуальная схема образца (*а*); оптическое изображение образца (*б*)

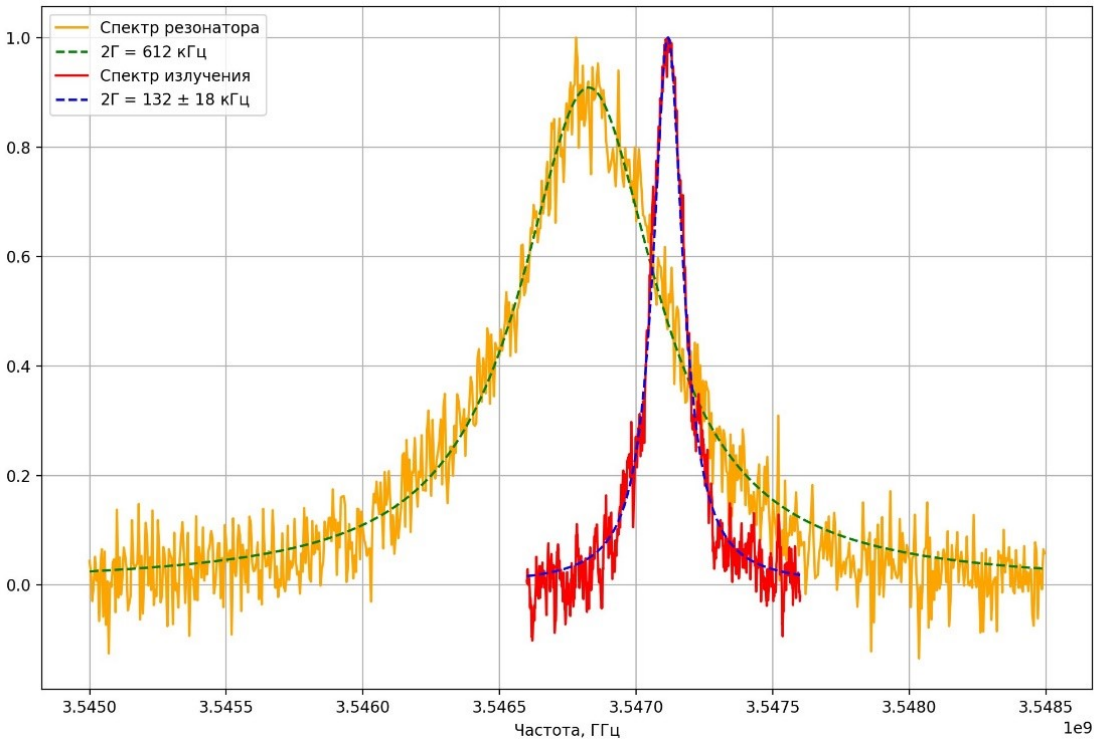


Рис. 2. Собственная ширина линии резонатора в эксперименте на отражение и спектр излучения резонатора при накачке потокового кубита, отнормированные на максимальные значения

Исходя из величины сужения спектра резонатора, можно утверждать, что нами было получено состояние с как минимум 4 фононами в поверхностном акустическом резонаторе [3].

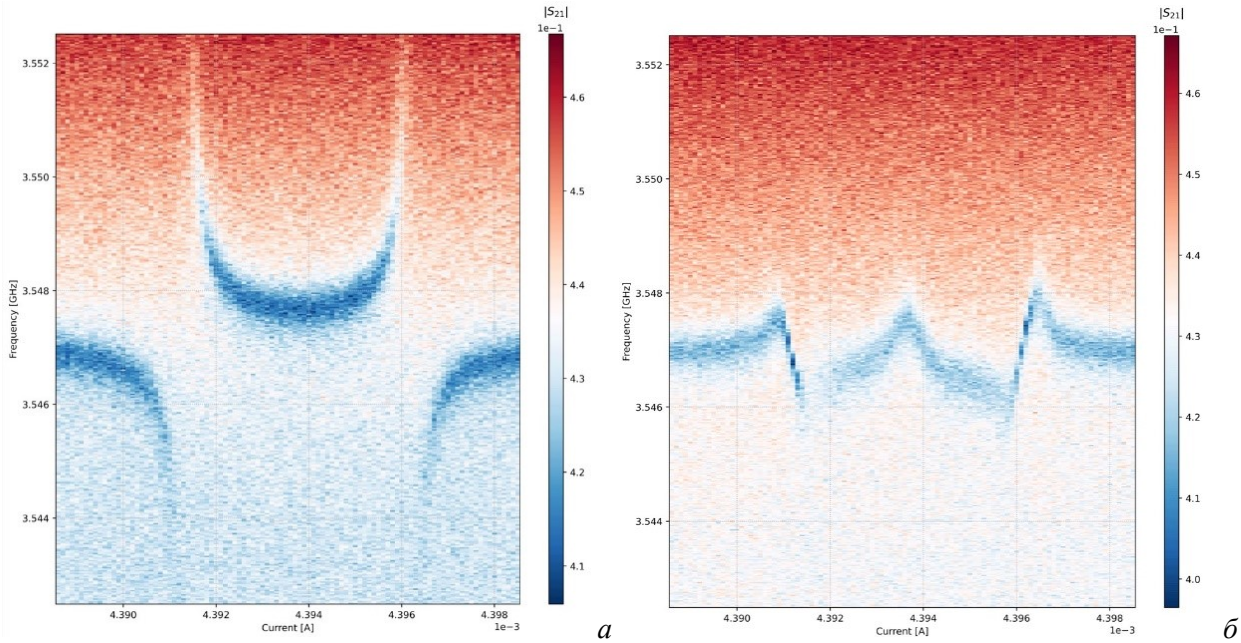


Рис. 3. Ампитуда сигнала при отражении от резонатора при разных частотах сигнала и разных значениях тока на искусственном атоме в случае отсутствия накачки потокового кубита (*а*); в случае включенной накачки потокового кубита на частоте двойного перехода (*б*)

Литература

1. *Bolgar A. N.* [et al.]. A phononic crystal coupled to a transmission line via an artificial atom // Commun. Phys. 2020. V.3:207. DOI: 10.1038/s42005-020-00475-2.
2. *Mirhosseini M.* [et al.]. Superconducting qubit to optical photon transduction // Nature. 2020. V. 588. P. 599–603. DOI: 10.1038/s41586-020-3038-6
3. *Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum optics. — Cambridge: Cambridge University Press, 1997. C. 277–279.

Секция суперкомпьютерного моделирования кинетических процессов

Председатель: Ю. Ю. Клосс (д. ф.-м. н., доцент)

Зам. председателя: В. А. Юсим (к. т. н.)

Секретарь: И. В. Говорун

Дата: 04.04.2024 Время: 11:00

УДК 54.061

Численное моделирование процессов синтеза неорганических соединений фторидов при ГНК в КГМТУ

***В. А. Юсим*[1,2], *С. Э. Саркисов*[2], *Р. К. Калимуллин*[2], *К. В. Кондратьев*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]НИЦ «Курчатовский институт»

Данное исследование является одним из этапов выполняемых работ [1], посвященных анализу сложного теплообмена при горизонтально направленной кристаллизации (ГНК) в разрабатываемом принципиально новом комбинированном графито-молибденовом тепловом узле (КГМТУ) в программном комплексе (ПК) SolidWorks. Целью данной работы являлось выявление влияния на температурное поле тепловой системы геометрических и режимных факторов, а также условий теплообмена с окружающими поверхностями на основе расчетных данных SolidWorks.

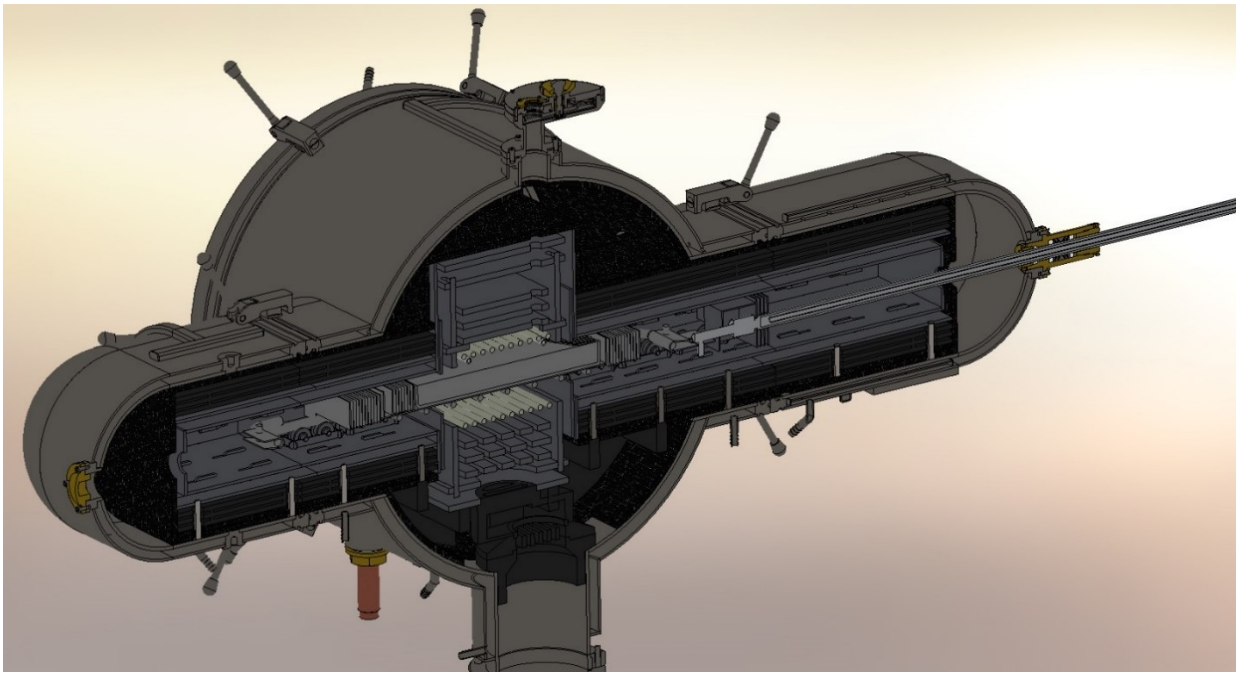


Рис. 1. Модель конструкции КГМТУ, помещенного в модернизированный кристаллизационный аппарат «Рубитек-1»

В исследование изучается квазистационарная математическая модель процесса синтеза неорганических соединений фторидов методом ГНК в КГМТУ с жидкостной герметизацией расплава, учитывающая теплоперенос в кристалле, расплаве, КГМТУ, а также модернизированном кристаллизационном аппарате, теплообмен излучением между нагревателем и содержимым тигля, формирование фронта

кристаллизации и выделение теплоты на нем, образование мениска на границе расплав/кристалл. В рамках квазистационарного приближения процесс кристаллизации рассматривается как серия стационарных состояний, однозначно определяющихся внешним температурным режимом, скоростью протяжки и объемом расплава. Численно изучено влияние скорости протяжки и температуры нагревателя на форму фронта кристаллизации.

По результатам расчетов были определены картины температурного распределения в КГМТУ, в тигле с кристаллом и модернизированном кристаллизационном аппарате. Получены необходимые данные о влияние температурных полей на форму фронта кристаллизации. Установлено, что конструкция КГМТУ создает аналогичные тепловые условия раннее исследованным тепловым узлам [2, 3] обеспечивающие слегка выпуклую изотерму фронта роста, что является необходимым условием для выращивания оптически совершенных монокристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ Курчатовский институт (приказ № 89 от 20.01.2023 г.).

Литература

1. *Юсим В. А., Саркисов С. Э., Клосс Ю. Ю.* Численное моделирование состояний тепловой системы в процессе синтеза монокристаллов фторидов методом ГНК в комбинированных ростовых узлах // Материалы XXIII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2023). 2023. С. 86–88.
2. *Yusim V.* [et al.]. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for horizontal directional solidification method // J. Phys.: Conf.: Ser. 2020 V. 1560: 012060.
3. *Yusim V.* [et al.]. Influence of the temperature field in the energy-saving carbon-graphite thermal unit on configuration of the solidification front under different conditions of growing fluoride single crystals by the HDS method // J. Phys.: Conf. Ser. 2021 V. 2056: 012045.

УДК 519.876.5

Разработка программного солвера на GPU CUDA для решения уравнения релаксации для однородного газа

***А. А. Шульгин*[1,2], *Ф. Г. Черемисин*[1,3], *Ю. Ю. Клосс*[1,2]**

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

Разработка вычислительных алгоритмов для решения уравнения релаксации представляет интерес ввиду необходимости выяснения физических характеристик реального или модельного газов. Уравнение релаксации в данном контексте есть часть уравнения Больцмана, которое можно разделить на две составных части: уравнение адвекции, описывающее изменения функции распределения газа вследствие его конвективного переноса, и уравнение релаксации, учитывающее изменение состояния газа из-за столкновений молекул

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_x \frac{\partial f}{\partial x} + \boldsymbol{\xi}_y \frac{\partial f}{\partial y} + \boldsymbol{\xi}_z \frac{\partial f}{\partial z} = I(f),$$

где $J(f)$ — *интеграл столкновений*:

$$I(f) = \int_0^{b_{max}} \int_0^{2\pi} \int_{-\xi_{cut}}^{\xi_{cut}} b db d\varepsilon d\boldsymbol{\xi_1} \left(f' f_1' - f f_1 \right) \tag{1}$$

В решении предлагается элементарная модель взаимодействия между частицами — модель *твердых шаров* [1]:

$$U(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \infty, |\boldsymbol{r}| \le b_{max}, \\ 0, |\boldsymbol{r}| > b_{max}, \end{cases}$$

В работе [2] предлагается алгоритм вычисления интеграла (1) *проекционным методом*, который формулируется следующим образом

$$I_\gamma = \frac{\pi b_{max} V_{sph}}{2} \cdot \frac{N_0}{N_\nu} \sum_{\nu=1}^{N_\nu} \left\{ \delta_{\alpha_\nu,\gamma} + \delta_{\beta_\nu,\gamma} - (1-r_\nu)\left(\delta_{\lambda_\nu,\gamma} + \delta_{\mu_\nu,\gamma}\right) - r_\nu\left(\delta_{\lambda_\nu+s_\nu,\gamma} + \delta_{\mu_\nu-s_\nu,\gamma}\right) \right\} \Omega_\nu$$

$$\Omega_\nu = \left\{ \left(f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu}\right)^{1-r_\nu} \left(f_{\lambda_\nu+s_\nu} f_{\mu_\nu-s_\nu}\right)^{1-r_\nu} - f_{\alpha_\nu} f_{\beta_\nu} \right\} \left|\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{\alpha_\nu}} - \boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{\beta_\nu}}\right| b_\nu \qquad (2)$$

$$r_\nu = \frac{E_{0\nu} - E_{1\nu}}{E_{2\nu} - E_{1\nu}}, E_{0\nu} = \xi_{\alpha_\nu}^2 + \xi_{\beta_\nu}^2, E_{1\nu} = \xi_{\lambda_\nu}^2 + \xi_{\mu_\nu}^2, E_{2\nu} = \xi_{\lambda_\nu+s_\nu}^2 + \xi_{\mu_\nu-s_\nu}^2,$$

где γ — индекс по скоростной сетке $\{\xi_x, \xi_y, \xi_z\}$, α_ν, β_ν — исходные узлы в скоростной сетке сталкивающихся частиц, $\lambda_\nu, \mu_\nu, \lambda_\nu + s_\nu, \mu_\nu - s_\nu$ — интерполированные в сетку узлы скоростей после столкновения. Последние выбираются таким образом, чтобы выполнялись основные законы сохранения.

Каждое столкновение моделируется одним узлом восьмимерной сетки Коробова, шесть измерений в котором — скорости сталкивающихся частиц, а седьмое и восьмое измерения — прицельный параметр и угол, соответственно.

Рассмотренный выше метод (2) именуется как *Projection Interpolation Method* (PIM). В работе также реализован *Symmetric Projection Method* (SPM), применяя который можно избежать возможных отрицательных значений у функции распределения:

$$I_\gamma = \frac{\pi b_{max} V_{sph}}{4} \cdot \frac{N_0}{N_\nu} \sum_{\nu=1}^{N_\nu} \left\{ \left(\delta_{\alpha_\nu,\gamma} + \delta_{\beta_\nu,\gamma}\right) \left[(1-r_\nu^*)\Delta_\nu^{(1)} + r_\nu^* \Delta_\nu^{(2)} - \Delta_\nu^{(0)} \right] + \right.$$

$$\left. \left(\delta_{\lambda_\nu,\gamma} + \delta_{\mu_\nu,\gamma}\right) \left[(1-r_\nu)\Delta_\nu^{(0)} - (1-r_\nu^*)\Delta_\nu^{(1)} \right] + \left(\delta_{\lambda_\nu+s_\nu,\gamma} + \delta_{\mu_\nu-s_\nu,\gamma}\right) \left[r_\nu \Delta_\nu^{(0)} - r_\nu^* \Delta_\nu^{(2)} \right] \right\} b_\nu,$$

где $r_\nu^* = \frac{r_\nu \Delta_\nu^{(1)}}{\left[r_\nu \Delta_\nu^{(1)} + (1-r_\nu)\Delta_\nu^{(2)}\right]}, \Delta_\nu^{(1)} = f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu}, \Delta_\nu^{(2)} = f_{\lambda_\nu+s_\nu} f_{\mu_\nu-s_\nu}, \Delta_\nu^{(0)} = f_{\alpha_\nu} f_{\beta_\nu}.$

Начальное неравновесное состояние газа описывается следующим выражением:

$$f(\boldsymbol{\xi}, 0) = \frac{1}{2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[\exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u})^2}{2T} \right) + \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{u})^2}{2T} \right) \right], \qquad (3)$$

где $\boldsymbol{u}$ — некоторая средняя скорость газа. В результате расчетов начальное распределение (3) в виде двух «колоколов» переходит в более устойчивое состояние, переходя к распределению Максвелла (рис. 1).

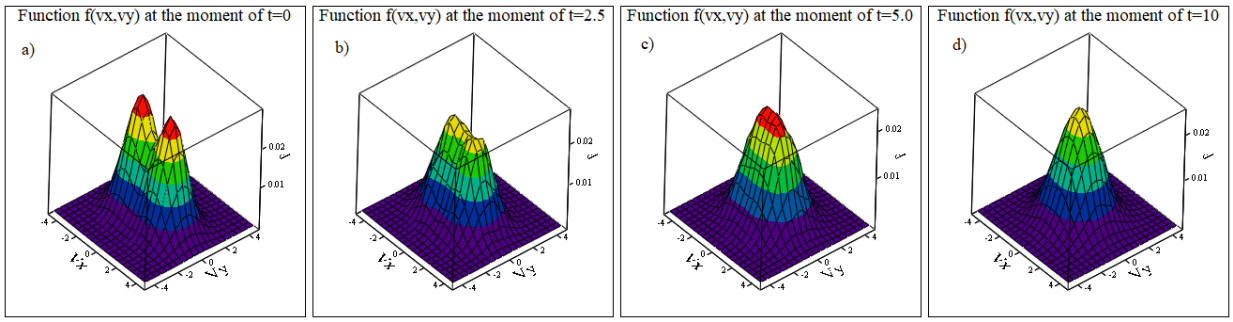


Рис. 1. Эволюция функции распределения в моменты времени: a) 0; b) 2,5; c) 5; d) 10

Функция распределения изображается по уровню $\xi_z = \xi_{\frac{N_z}{2}}$, где N_z — максимальное количество узлов по оси ξ_z.

Алгоритм был распараллелен по узлам сетки Коробова, или по «столкновениям», на графическом процессоре с помощью средств разработки CUDA. На графическом процессоре Nvidia RTX 3050 удалось достичь ускорения в 74 раза по отношению к последовательному алгоритму. Помимо средств основной библиотеки CUDA использовалась библиотека Thrust [3], обладающая аналогами функций стандартной библиотеки STL C++, которые способны выполняться параллельно на ядрах GPU.

Литература

1. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. *Tcheremissine F. G.* Testing and acceleration of the conservative projection method for solving Boltzmann kinetic equation // AIP Conference Proceedings. 2015. V. 1648: 230005.
3. API reference guide for Thrust // Nvidia docs : [Электронный ресурс]. URL: https://docs.nvidia.com/cuda/thrust/index.html (дата обращения: 16.02.2024).

УДК 544.25; 538.9

Динамическая диэлектрическая спектроскопия фторированного жидкого кристалла T3419

***А. Д. Курилов*[1,2], *А. В. Губарева*[2], *М. К. Кузьмин*[2], *М. М. Кузнецов*[2], *Д. Н. Чаусов*[1,2]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Государственный университет просвещения

Фторированные жидкие кристаллы представляют собой важный класс материалов с уникальными свойствами для передовых высокотехнологичных применений в электрооптических устройствах [1–3]. Включение фтора в органические соединения приводит к значительным изменениям в их диэлектрических и электрооптических характеристиках. Целью данной работы является комплексное исследование диэлектрических свойств нематического фторированного жидкого кристалла 2',3,4-трифтор-4"-пропил-1,1':4',1"-терфенила (T3419). Исследование включает в себя анализ фазовой диаграммы, полученной с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии и поляризационной микроскопии. В диапазоне частот от 10^1 до 10^7 Гц получены спектры комплекснозначных компонент тензора диэлектрической проницаемости, рассчитаны значения удельной ионной проводимости и времена диэлектрической релаксации при вращении молекул вокруг короткой оси.

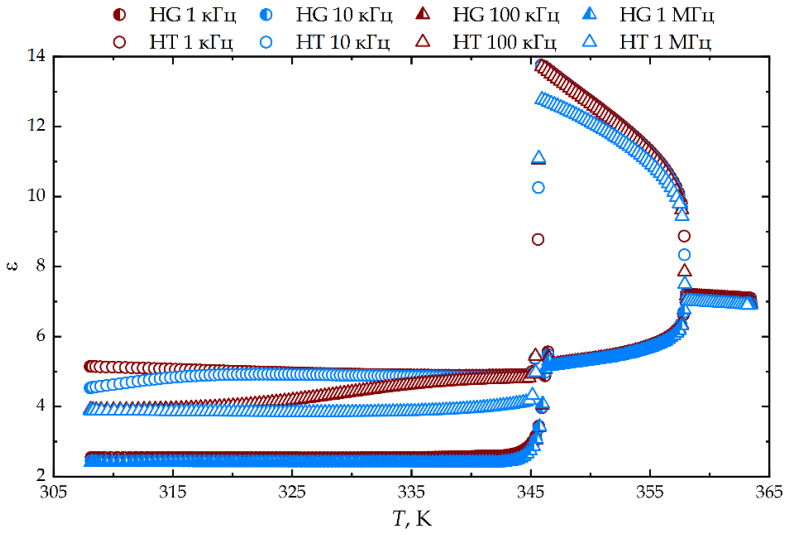


Рис. 1. Температурные зависимости продольной (HT) и поперечной (HG) компонент диэлектрической проницаемости T3419 при различных частотах тест-сигнала

Установлено, что T3419 обладает монотропной смектической фазой SmA, которая появляется при охлаждении из нематической фазы N. Кроме того, исследуемый жидкий кристалл характеризуется высокотемпературной точкой просветления N–Iso и значительной диэлектрической анизотропией, обусловленной высоким дипольным моментом связи C–F. Температурные зависимости продольной и поперечной компонент диэлектрической проницаемости при различных частотах тест-сигнала представлены на рис. 1. В смектической фазе SmA наблюдается дисперсия диэлектрической проницаемости, обусловленная релаксационным процессом вращения молекул вокруг короткой оси. Переход SmA–N сопровождается скачкообразным снижением времени релаксации. В области низких частот наблюдается рост эффективной диэлектрической проницаемости с увеличением температуры, связанный с увеличением двойного электрического слоя на обкладках измерительной ячейки. Зависимость добавочной емкости двойного электрического слоя и удельной ионной проводимости от температуры хорошо описывается законом типа Аррениуса, характеризуемой единой энергией активации.

Литература

1. *Lopes L. D., Merlo A. A.* Born to be a Liquid Crystal: The role of fluorinated chain in the design and synthesis of new mesogens // Journal of Molecular Liquids. 2022. V. 349: 118157. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118157.
2. *Yang C.* [et al.] Fluorinated liquid crystals and their mixtures giving polar phases with enhanced low-temperature stability // Liquid Crystals. 2024. P. 1–11. DOI: 10.1080/02678292.2024.2306309.
3. *Du S.* [et al.] Improved mesomorphic behaviour and large birefringence of fluorinated liquid crystals containing ethynyl and 1-methyl-1H-benzimidazole moieties // Liquid Crystals. 2020. V. 47(9). P. 1264–1273. DOI: 10.1080/02678292.2019.1710781.

УДК 004.9

К вопросу о совершенствовании технологии синтеза монокристаллов методом ГНК путем разработки и использования математических моделей

***Ф. А. Юсим*[2], *К. В. Кондратьев*[2], *В. А. Юсим*[1,2], *С. Э. Саркисов*[2], *Ю. Ю. Клосс*[1,2], *Л. В. Иванова*[3]**

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

В настоящий момент времени, когда в ряде отраслей промышленности происходят достаточно интенсивные процессы модернизации и оптимизации, роль систем управления, в том числе автоматизированных систем существенно возрастает и становится ключевой. Существенно возрастают и требования к качеству продукции, что налагает дополнительные условия работы автоматизированных систем [1]. Данные факты способствуют возрастанию роли математических моделей в создание так называемых, виртуальных объектов управления — для использования в предпроектных исследованиях систем управления (отработки моделей реального времени, настройки подсистем АСУ ТП и т. д.).

На сегодняшний день математическое моделирование кристаллизационных аппаратов для метода ГНК как объекта автоматического управления является актуальной задачей, так как при создании новых систем автоматического управления требуются более точные модели, учитывающие весь спектр сложных процессов при высокотемпературной кристаллизации. Экономическое обоснование данной точности выражается в минимизации затрат на расходы электроэнергии, повышения выхода годных монокристаллов и в увеличении долгосрочности эксплуатации кристаллизационных аппаратов. Таким образом, в АСУ ТП кристаллизационных аппаратах нами применялись несколько различных общепринятых моделей [2, 3], которые в совокупности полностью описывают процесс синтеза монокристаллов. Основными моделями являлись: 1) геометрическая модель; 2) оценка теплового состояния синтезируемых монокристаллов; 3) оценка продолжительности нагрева; 4) оценка состояния системы в различных режимах роботы; 5) модель управления тепловым режимом кристаллизационного аппарата.

Использование для разработки мер по совершенствованию технологии синтеза в кристаллизационных аппаратах расчетов на ЭВМ, а также внедрение АСУ ТП нагрева требует наличия адекватных математических моделей, позволяющих определять состояние системы в процессе роста монокристалла, распределение температуры в тигле с материалом при различных его смещениях и т. д. В основе таких моделей лежит совместное решение задач внешнего и внутреннего теплообмена и уравнений теплового баланса при разных исходных данных и краевых условиях. Разработанные нами математические модели кристаллизационных аппаратов позволили проводить как различные проверочные расчеты (например состояние границы кристалл/расплав) при заданном температурном режиме работы печи, так и определение с помощью ЭВМ температурного режима нагрева и отжига. Для описания состояния тепловой системы в процессе синтеза использовались трехмерные уравнения теплопроводности, модель внешнего теплообмена была представлена в лучисто-конвективной форме.

Адекватность моделей реальному процессу осуществлялась методами идентификации. В этом случае информация о температуре внутри кристаллизационного аппарата во время нагрева, процесса и отжига (температура различных модулей теплового узла, температура синтезируемого кристалла и т. д.) является источником оценки качества модели и разработки простых и надежных алгоритмов идентификации. Так контроль температуры греющей среды в кристаллизационном аппарате и сравнение этого значения с рассчитанным позволит проводить коррекцию задачи оптимального управления.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ Курчатовский институт (приказ № 89 от 20.01.2023 г.).

Литература

1. *Лисиенко В. Г.* [и др.]. Моделирование сложных вероятностных систем — М.: Изд-во УрФУ, 2011.
2. *Мальцев А.Е., Симкин А.И.* Использование математических моделей в асу тп нагревательных печей // Збірник наукових праць : XI Міжнародна науково-технічна конференція аспірантів і студентів, 17–20 травня 2011 р. С. 187–189.
3. *Глезер В.В.* Интеграция математической модели в полигон асу тп на примере ПЛК "ОВЕН" // ДНИ НАУКИ НГТУ-2014. материалы научной студенческой конференции (итоги научной работы студентов за 2013–2014 гг.). 2014. С. 27.

УДК 519.876.5

Исследование расходимости молекулярного пучка в коллиматоре в зависимости от наличия подкачки газа в резервуар

***Е. Комаров*[1], *О. В. Воронова*[2], *Ю. В. Широковская*[2]**

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

Проведено исследование расходимости молекулярного пучка в зависимости от присутствия или отсутствия подкачки газа в резервуар. Для решения уравнения Больцмана [1] были применены консервативные конечно-разностные методы [2, 3] с использованием TVD-схемы [4]. Для вычисления интеграла столкновений использовалась специализированная библиотека [5, 6].

На левой стенке резервуара были установлены либо граничное условие диффузного отражения, либо условие постоянного входящего потока частиц. Показано, что наличие входящего потока частиц не оказывает влияния на расходимость. Для случая диффузного отражения было проверено сохранение полной энергии и импульса.

В рамках исследования было смоделировано истечение газа из однородно заполненного резервуара в вакуум. Схема установки приведена на рис. 1.

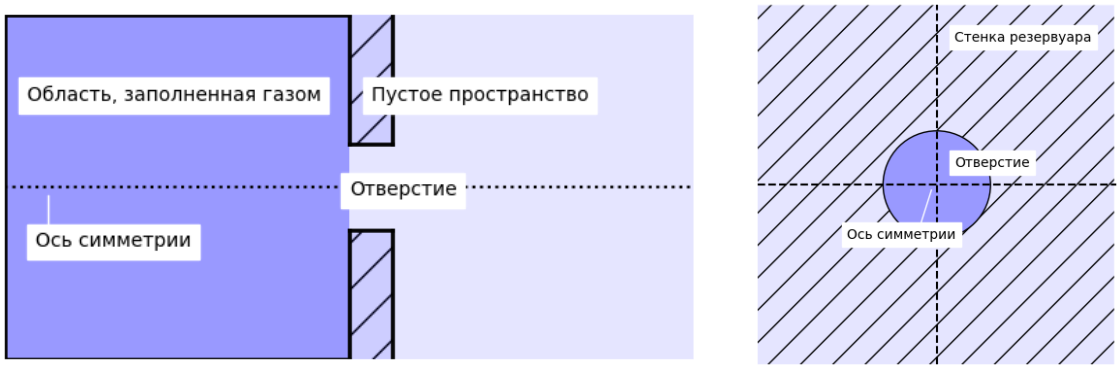


Рис. 1. Схема установки в модельной задаче

На левой стенке резервуара были установлены либо условие диффузного отражения, либо условие постоянного входящего потока для поддержания концентрации. На остальных стенках резервуара и трубки коллиматора было применено диффузное граничное условие, а на остальных границах было установлено нулевое условие, позволяющее газу покидать область счета, но не возвращаться обратно.

Приложение, разработанное в предыдущих работах [7], было дополнено возможностью указывать температуру и коэффициент диффузного отражения для стенок, на которых устанавливаются граничные условия. Вычисления осуществлялись с использованием технологии CUDA. С его помощью была смоделирована эволюция ф. р., рассчитана концентрация и оценена расходимость пучка согласно методу, предложенному в [7].

Полученные результаты представлены в табл. 1 для толщины стенки $d_w = 2$и радиуса отверстия $r_h = 4$.

Результаты демонстрируют, что присутствие постоянного входящего потока частиц не оказывает влияния на расходимость пучка.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 19-29-02018) и НИЦ Курчатовский институт (приказ № 1919 от 25.09.2020 г.). Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов ЦОД НИЦ «Курчатовский институт» (http://computing.nrcki.ru/).

Таблица 1. Итоговые параметры струи

Размеры сетки	$a: R(x) = a \cdot x + b$	$\alpha = tan^{-1}(a)$
100x25x25x10x10x10 (с подкачкой)	0.413 ± 0.002	$22.4° \pm 0.1°$
100x25x25x20x20x20 (с подкачкой)	0.414 ± 0.004	$22.5° \pm 0.2°$
100x25x25x10x10x10 (без подкачки)	0.410 ± 0.002	$22.3° \pm 0.1°$
100x25x25x20x20x20	0.413 ± 0.003	$22.4° \pm 0.2°$

Литература

1. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. *Черемисин Ф. Г.* Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа // ЖВМ и МФ. 1970. Т. 10. № 3. С. 654–665.
3. *Аристов В. В., Черемисин Ф. Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана. — Доклады АН СССР, 1976. Т. 231. № 1.
4. *Самарский А. А., Вабищевич П. Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики — М.: Наука, 2001.
5. *Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана. — Доклады РАН, 1997. Т. 357. № 1.
6. *Додулад О. И.* [и др.]. Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. Т. 12. С. 40–47.
7. *Komarov E., Kloss Yu. Yu., Tcheremissine F. G.* Simulation and analysis of physical characteristics of a molecular beam in a collimator using methods of kinetic theory // Journal of Physics: Conference Series 1560. 2020: 012062. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012062.
8. *Suchard M. A.* [et al.]. Understanding GPU Programming for Statistical Computation: Studies in Massively Parallel Massive Mixtures // Journal of Computational & Graphical Statistics (JCGS). 2010. V. 19. P. 419–438.

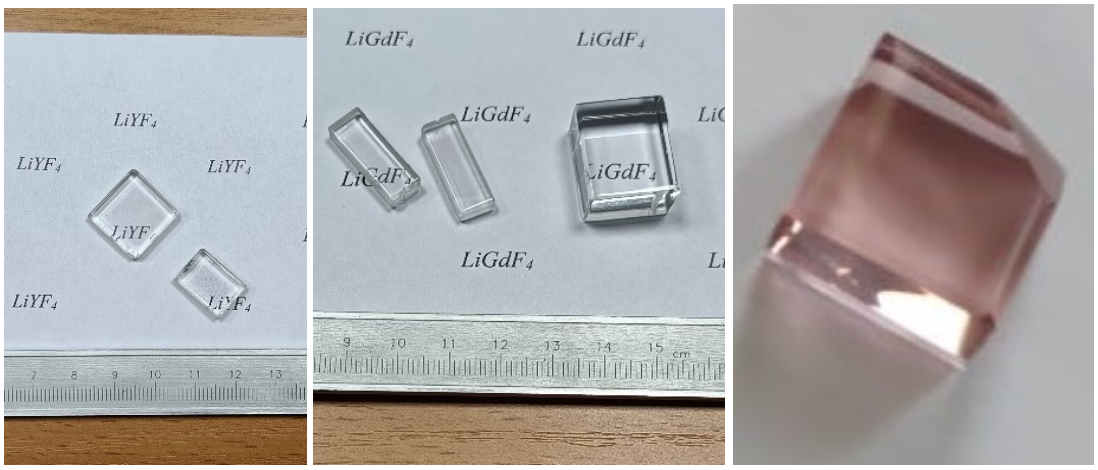
УДК 54.061

Влияние γ-облучения на оптические и энергетические спектры фторидных одно- и многокомпонентных кристаллических систем, активированных ионами Ce3+

***С. Э. Саркисов*[2], *В. А. Юсим*[1,2], *Ю. Ю. Клосс*[2], *Ф. А. Юсим*[2]**

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

Проведено сравнение сцинтилляционных свойств активированных ионами Ce^{3+} кристаллов LiF и семейства многокомпонентных соединений LiF-RF_3 (R=Y, Gd) (рис. 1*а–б*), предложенных в качестве чувствительных к тепловым нейтронам и γ-излучению материалов. Аномально большое сечение радиационного захвата тепловых нейтронов у гадолиния и рассчитанные высокие значениями эффективного зарядового номера Z многокомпонентных соединений, обусловливают их эффективность в качестве нейтронных и гамма сцинтилляторов по сравнению с LiF. Проанализированы спектры поглощения необлученных и γ-облученных кристаллов LiF (рис. 1*в*), активированных ионами церия. Идентифицированы полосы наведенных центров окраски. Исследована конверсия степени окисления ионов $Ce^{4+} \rightarrow Ce^{3+}$, связанная с воздействием на кристаллы γ-квантов. Световой выход всех исследуемых кристаллов определяли сравнением положения максимумов пиков полного поглощения с положением максимума пика полного поглощения стандартного образца NaI(Tl) в энергетических спектрах от γ-источника ^{137}Cs с энергией 662 кэВ. Обнаружен, и объясняется в рамках участия γ-наведенных центров окраски (F и F^- центров), эффект увеличения светового выхода, при воздействии γ-квантов на кристаллы LiF с ионами Ce^{3+}. Проанализирована возможность дополнительного повышения световой эффективности за счет сенсибилизированной люминесценции в кристаллах $LiGdF_4:Ce^{3+}$.



а *б* *в*

Рис. 1. Обработанный монокристалл в виде пластин и брусков $LiYF_4:Ce^{3+}$ (*а*) и Обработанный монокристалл в виде пластин и брусков $LiGdF_4:Ce^{3+}$ (*б*); Облученный γ-квантами монокристалл $LiGdF_4:Ce^{3+}$ (*в*)

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ Курчатовский институт (приказ № 89 от 20.01.2023 г.).

УДК 54.061

Примесный и гамма-стимулированный эффект увеличения прозрачности кристаллов CaF_2 в области фундаментального края

***С. Э. Саркисов*[2], *В. А. Юсим*[1,2], *Т. А. Сазыкина*[2], *А. С. Рябушенко*[2]**

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

Сравнением спектров поглощения выявлены активаторные редкоземельные ионы, при которых наблюдается эффект УФ снижения оптической плотности, объясняемый сдвигом межзонного поглощения кристалла CaF_2 в дальнюю ультрафиолетовую область. Проведенные эксперименты показали, что многократное увеличение прозрачности CaF_2 в интервале длин волн 190-200 нм происходит при легировании кристаллов ионами европия и иттербия, принадлежащих элементам с самыми низкими значениями химических потенциалов в лантаноидном ряду. Данная особенность, обусловливает способность Eu^{3+} и Yb^{3+} к зарядовой конверсии степени окисления (+3→+2). Проведено сравнение спектров поглощения этих ионов со спектрами ионов Nd^{3+} и Er^{3+}, не обнаруживающих изменения заряда при γ-облучении кристаллов CaF_2, и которые по величине химических потенциалов сравнимы с остальными элементами ряда, у которых этот параметр в 2-5 раз больше, чем у Eu и Yb. Отдельно исследованы спектральные особенности поглощения Gd^{3+} как в качестве примесных ионов (до 2 мол.%) простых кристаллов CaF_2, так и кристаллохимического компонента смешанных кристаллов CaF_2-10 мол.% GdF_3. Особенность Gd состоит в том, что в отличие от остальных элементов редкоземельного ряда его основные энергетические 4f-уровни в трехвалентном и двухвалентном состоянии, соответственно расположены на потолке валентной зоны и чуть глубже дна зоны проводимости.

В прикладном плане, обнаруженный эффект представляет интерес для создания оптических материалов с улучшенным оптическим пропусканием в дальнюю УФ область (FUV-область), используемых в системах УФ телекоммуникации UVC (ultraviolet communication), мониторинга околоземного и космического пространства в дальнем УФ-диапазоне в экологических и военных целях, а также в производстве линз для систем УФ микрофотолитографии [1, 2]. Полученные кристаллы CaF_2, легированные ионами Eu^{2+} и $Yb^{3+/+2}$ с улучшенными параметрами оптического пропускания после γ-облучения могут также представлять интерес в качестве оптических материалов радиационно-стойкой УФ оптики.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ Курчатовский институт (приказ № 89 от 20.01.2023 г.).

Литература

1. *Hamman K.* Review of Sustainable Energy — Without the Hot Air by David MacKay (2009) // Numeracy. 2016. V. 9(2): 9. DOI: 5038/1936-4660.9.2.9.
2. *Kojima A.* [et al.] Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells // J. Am. Chem. Soc. 2016 V. 131(17). P. 6050–6051. DOI: 10.1021/ja809598r.

УДК 519.876.5

Исследование методов решения дифференциального уравнения Больцмана с ненулевой правой частью, включая использование процессора Intel и видеокарты Nvidia

***Е. Комаров*[1], *Ю. Ю. Клосс*[1,2], *И. В. Говорун*[1,2], *Л. А. Сазыкина*[2,3]**

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3] ООО «ЛОКиП»

Исследование, представленное в данной работе, направлено на изучение эффективных методов организации параллельных вычислений для численного решения кинетического уравнения Больцмана с использованием графического процессора (GPU) компании Nvidia, а также центрального процессора (CPU) Intel.

Физическая задача [1] состоит в нахождении функции распределения, зависящей от шести параметров (трех в пространстве координат и трех в пространстве скоростей), с использованием явной разностной схемы при заданных граничных и начальных условиях. В рамках исследования разработаны два метода численного решения данной задачи: с применением GPU и CPU.

Исходя из использованной явной [2] разностной схемы, возможно проведение независимых вычислений значений функции в различных точках пространства. Однако из-за особенностей физической задачи независимые вычисления для различных значений скорости невозможны [3, 4]. Тем не менее вычисление значения на следующем временном слое не является вычислительно сложной операцией.

Параллельные вычисления организованы путем выделения каждому ядру области счета в пространстве, где каждое ядро производит независимые вычисления [5]. Для многоядерного GPU это возможно реализовать с помощью CUDA [6, 7], а для CPU — с помощью MPI [7]. Были разработаны вычислительные алгоритмы и программные решения для численного решения кинетического уравнения с использованием CUDA и MPI.

Эксперименты были проведены на различных сетках и включали 1000 шагов итерации. В результате показано, что использование GPU позволяет ускорить выполнение кода в 30–40 раз по сравнению с CPU. Отмечается, что дальнейшее увеличение производительности можно ожидать при использовании более мощных видеокарт, таких как Nvidia RTX 4090. Были получены результаты для различных сеток и 1000 шагов итерации (табл. 1). Видеокарта: Nvidia 1650 Max-Q — 1024 CUDA-ядра, 1,485 GHz, 4 Гб ОЗУ. Процессор: Intel i7-9750H — 6 ядер, 2,6 GHz, 16 Гб ОЗУ.

Таблица 1

Размеры сетки	Время CPU, с	Время GPU, с
100x25x25x10x10x10	$4{,}8\pm0{,}1 \cdot 10^3$	$4{,}4\pm0{,}1 \cdot 10^3$
100x25x25x20x20x20	$3{,}0\pm0{,}1 \cdot 10^4$	$1{,}0\pm0{,}1 \cdot 10^4$
100x25x25x30x30x30	$1{,}00\pm0{,}03 \cdot 10^5$	$2{,}2\pm0{,}1 \cdot 10^4$
100x25x25x40x40x40	-	$5{,}4\pm0{,}1 \cdot 10^4$
200x50x50x20x20x20	$1{,}17\pm0{,}03 \cdot 10^5$	$3{,}8\pm0{,}1 \cdot 10^4$

Из табл. 1 видно, что на небольших сетках использование GPU не приводит к значительному увеличению производительности, поскольку CPU обеспечивает сравнимую скорость работы благодаря более высокой тактовой частоте. Однако с расширением пространства скоростей в каждой точке, требуется выполнение большего объема вычислений, и здесь GPU с его множеством ядер может значительно ускорить выполнение кода, улучшая его производительность в 3–5 раз.

При использовании не-мобильных GPU можно ожидать еще большего увеличения скорости вычислений за счет более значительного количества ядер и доступной памяти. Например, у видеокарты Nvidia

RTX 4090 имеется 16384 ядра и до 80 Гб оперативной памяти, что обеспечивает значительный рост производительности в сравнении с мобильными вариантами GPU.

В дальнейших планах исследования планируется разработка эффективных алгоритмов и программных решений на основе технологий CUDA и MPI для полномасштабного моделирования и анализа неравновесных газокинетических процессов на кластерах, основанных на GPU.

Исследования выполнены при финансовой поддержке грантов РФФИ. Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов ЦОД НИЦ «Курчатовский институт» (http://computing.nrcki.ru/).

Литература

1. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа — М.: Наука, 1967.
2. *Самарский А. А., Вабищевич П. Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики — М.: Наука, 2001.
3. *Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана. — Доклады РАН, 1997. Т. 357. № 1.
4. *Додулад О. И.* [и др.]. Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. Т. 12. С. 40–47.
5. *Komarov E., Kloss Yu. Yu., Tcheremissine F. G.* Simulation and analysis of physical characteristics of a molecular beam in a collimator using methods of kinetic theory // Journal of Physics: Conference Series 1560. V. 2020: 012062. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012062.
6. *Suchard M. A.* [et al.]. Understanding GPU Programming for Statistical Computation: Studies in Massively Parallel Massive Mixtures // Journal of Computational & Graphical Statistics (JCGS). 2010. V. 19. P. 419-438.
7. *Preis T.* GPU-computing in econophysics and statistical physics // T. Eur. Phys. J. Spec. Top. 2011. V. 194: 87.

УДК 539.231

Тонкопленочные многослойные прозрачные токопроводящие структуры вида ITO/Ag/ITO для OLED дисплеев

***Н. С. Паращук*[1,2], *А. Д. Курилов*[1,2], *С. А. Стахарный*[1], *А. В. Нуриев*[1], *А. А. Морозов*[1], *К. М. Кузьмин*[1,2], *Д. Н. Чаусов*[1,2]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Государственный университет просвещения

Синтез тонкопленочных прозрачных электродов является актуальной задачей в различных областях, связанных с производством прозрачных электротехнических устройств. Данными электротехническими устройствами могут являться OLED и Micro-OLED [1], солнечные панели [2], прозрачные нагреватели [3] и прочее [4-11]. Усредненным критерием качества прозрачных электродов можно считать расчетный параметр *FoM*:

$$FoM = \frac{\tau}{\sqrt[10]{R_{sheet}}}, \quad (1)$$

где τ — среднее пропускание оптических волн, R_{sheet} — поверхностное сопротивление.

В соответствии с (1) качественный электрод должен обладать одновременно как высоким средним пропусканием оптических волн, так и низким поверхностным сопротивлением. На данный момент самым популярным решением в сфере прозрачных электродов является тонкопленочный ITO (Indium tin oxide) толщиной ~ 100 нм, нанесенный методом магнетронного напыления.

Электрооптические параметры ITO определяются не только толщиной слоя, но и другими параметрами напыления, к примеру — концентрацией O_2 в напылительной камере, уровнем вакуума и мощностью магнетрона. К тому же коммерчески производимые электроды ITO проходят процесс отжига при температуре ~ 350 °C, который значительно улучшает электрооптические характеристики оксидной полупроводниковой структуры. Данные аспекты, однако, неприменимы в случае изготовления органических электротехнических устройств из-за деградации органики вследствие температурного и/или кислородного воздействий.

Одним из возможных решений данной проблемы может являться бескислородное напыление ITO с отсутствием последующего термического отжига. В структурах вида Оксид/Металл/Оксид ITO выступает, преимущественно, в качестве относительно проводящего просветляющего покрытия, а снижение поверхностного сопротивления результирующей структуры достигают за счет тонкого (~ единиц нм) слоя металла. При оптимизации параметров структуры данный слой не должен вносить значительного вклада в оптическое пропускание и, при этом, должен значительно снижать поверхностное сопротивление электрода.

В результате выполнения работы нами разработан ряд образцов (рис. 1), состоящих из различных конфигураций ITO, нанесенного методом магнетронного напыления в атмосферах Ar или Ar + O_2, и Ag, нанесенного методом электронно-лучевого напыления. Выяснено, что достижение высокого *FoM* = 0,59 возможно добиться без использования O_2 атмосферы при использовании структуры ITO/Ag/ITO и, при этом, данный *FoM* практически идентичен показателю структуры, синтезированной с использованием O_2.

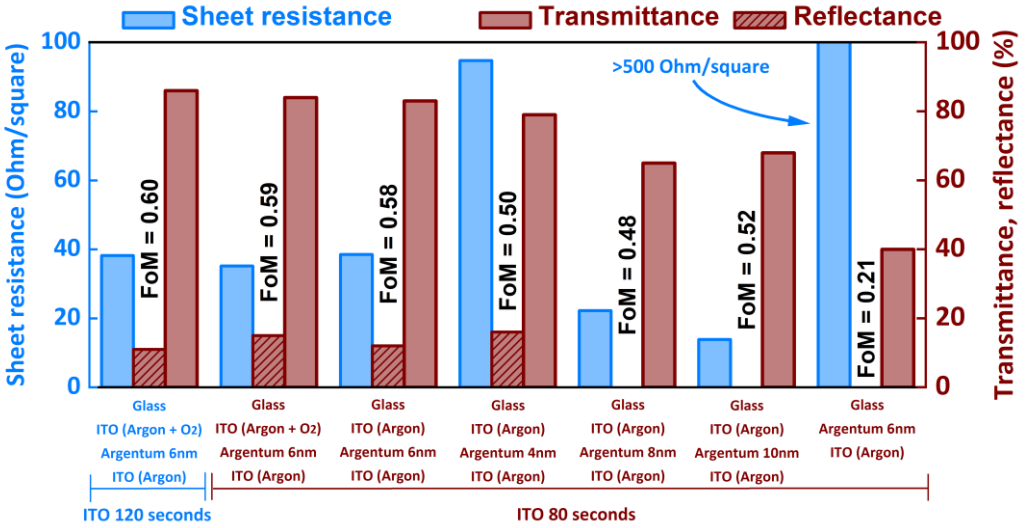


Рис. 1. Сводная диаграмма электрооптических параметров образцов, содержащих ITO и Ag

Литература

1. *Salehi A.* [et al]. Recent advances in OLED optical design // Advanced Functional Materials. 2019. V. 29(15): 1808803.
2. *Hu Z.* [et al]. A critical review on semitransparent organic solar cells // Nano Energy. 2020. V. 78: 105376.
3. *Papanastasiou D.T.* [et al]. Transparent heaters: A review // Advanced Functional Materials. 2020. V. 30(21): 1910225.
4. *Sun N.* [et al]. Performance of OLED under mechanical strain: a review // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2020. V. 31: 20688–20729.
5. *Lee D.* [et al]. Highly flexible, transparent and conductive ultrathin silver film heaters for wearable electronics applications //Thin Solid Films. 2020. V. 697: 137835.
6. *Nie B.* [et al]. High-performance transparent and conductive films with fully enclosed metal mesh // ACS Applied Materials & Interfaces. 2021. V. 13(34): 40806–40816.
7. *Cheng T.* [et al]. Flexible transparent bifunctional capacitive sensors with superior areal capacitance and sensing capability based on PEDOT: PSS/MXene/Ag grid hybrid electrodes //Advanced Functional Materials. 2023. V. 33(5): 2210997.
8. *Kim J.W.* [et al]. Efficiency-improved UWB transparent antennas using ITO/Ag/ITO multilayer electrode films // IEEE Access. 2021. V. 9: 165385–165393.
9. *So K. K., Chen B. J., Chan C. H.* Microwave and millimeter-wave MIMO antenna using conductive ITO film // IEEE Access. 2020. V. 8: 207024–207033.
10. *Serra C.C., Medeiros C.R., Costa J.R., Fernandes C.A.* Mirror-integrated transparent antenna for RFID application //IEEE Antennas Wireless Propag. Lett. 2011. V. 10. P. 776–779.
11. *Bing P.* [et al]. Photonic crystal fiber-based plasmonic sensor with ITO for medical applications // The European Physical Journal D. 2023. V. 77(4): 68.

УДК 519.876.5

Параллельный программный солвер кинетического уравнения Больцмана на основе технологии MPI

***Я. М. Жихарев*[1,2], *А. В. Рябушенко*[2], *Т. А. Сазыкина*[2]**

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

В данной работе описывается реализация параллельной версии программы для моделирования смеси газов в микронасосе. Программа написана на языке C++, а обработка результатов осуществляется с помощью библиотек языка python. Для распараллеливания использовался OpenMPI и openmp. Была

осуществлена пространственная декомпозиция системы, схематично изображенная на рис.1. В результате каждый процесс работает с небольшим множеством узлов пространственной сетки, а не со всей системой. Это позволяет моделировать системы различных геометрических размеров просто увеличивая число использованных процессов. Уравнение Больцмана решается с помощью консервативного проекционного метода [1]. Каждый шаг отдельный процесс решает задачу релаксации для смеси газов и уравнения переноса. Затем с помощью разностной схемы проводится решение уравнений переноса, при котором осуществляется обмен значений функций распределения на границах областей между процессами. При работе программы проводится контроль сохранения массы вещества внутри системы и отсутствия отрицательных значений функций распределения. Программа позволяет использовать произвольное число узлов, что применялось для удобного перебора геометрических размеров микронасоса. Данная реализация позволяет проводить расчеты как на персональных компьютерах, так и на суперкомпьютерах.

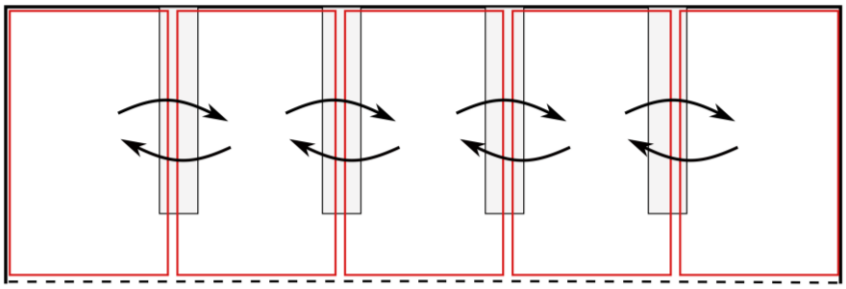


Рис. 1. Пример пространственной декомпозиции устройства

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов ЦОД НИЦ «Курчатовский институт» (http://computing.nrcki.ru/).

Литература

1. *Додулад О. И.* [и др.]. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // ЖВМ и МФ. 2016. Т. 56. № 6. С. 1008–1024.
2. *Карпов В. Е., Лобанов А. И.* Численные методы, алгоритмы и программы. Введение в распараллеливание. — М.: Физматкнига, 2014.

УДК 544.252, 004.4

Аппаратно-программный комплекс для исследования электрооптических параметров нематических жидких кристаллов

***И. С. Чекулаев*[1,2], *А. Д. Курилов*[1,2], *Д. Н. Чаусов*[1,2], *В. В. Беляев*[2], *В. А. Жачкин*[2], *М. К. Кузьмин*[2]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Государственный университет просвещения

С целью исследования дисперсии двулучепреломления и снижения погрешности определения электрооптических параметров жидкокристаллических систем в широком диапазоне температур (–40–150°C) и длин волн (450–900 нм) был разработан автоматизированный аппаратно-программный комплекс [1]. Испытание разработанного комплекса было проведена на жидкокристаллической смеси ЖК-1289, которая ранее была хорошо исследована [2, 3].

В основе комплекса лежит вольт-контрастный метод исследования жидкокристаллических материалов. В качестве источника света использовалась эталонная лампа DH-2000. Ячейка с заполненным ЖК-1289 между двумя поляризаторами под углом ±45° между разрешенным направлением каждого из поляризаторов и натиркой ориентирующего слоя. Прошедший свет регистрировался спектрофотометров S3000 с погрешностью определения длины волны 0,5 нм. Регулирования температуры образца проводилось ПИД-контроллером ТСМ-Х107, с точностью задания температуры 0,01°C и стабилизацией 0,02°C. Погрешность установления напряжения ≈ 0,2%.

Полученные спектры пропускания света сквозь жидкокристаллическую ячейку представлены на рис. 1. Анализируя полученные графики видно, что пропускание на разных длинах волнах имеет разное количество экстремумов, что связано с дисперсией двулучепреломления.

Полученные значения зависимости двулучепреломления от температуры, представленные на рис. 2, сходятся с литературными данными. [2,3]. Проводя анализ рассчитанных электрооптических параметров выявлено, что разработанный комплекс позволяет снизить случайную погрешность в 4 раза за счет статистической обработки и снижения погрешности установления температуры.

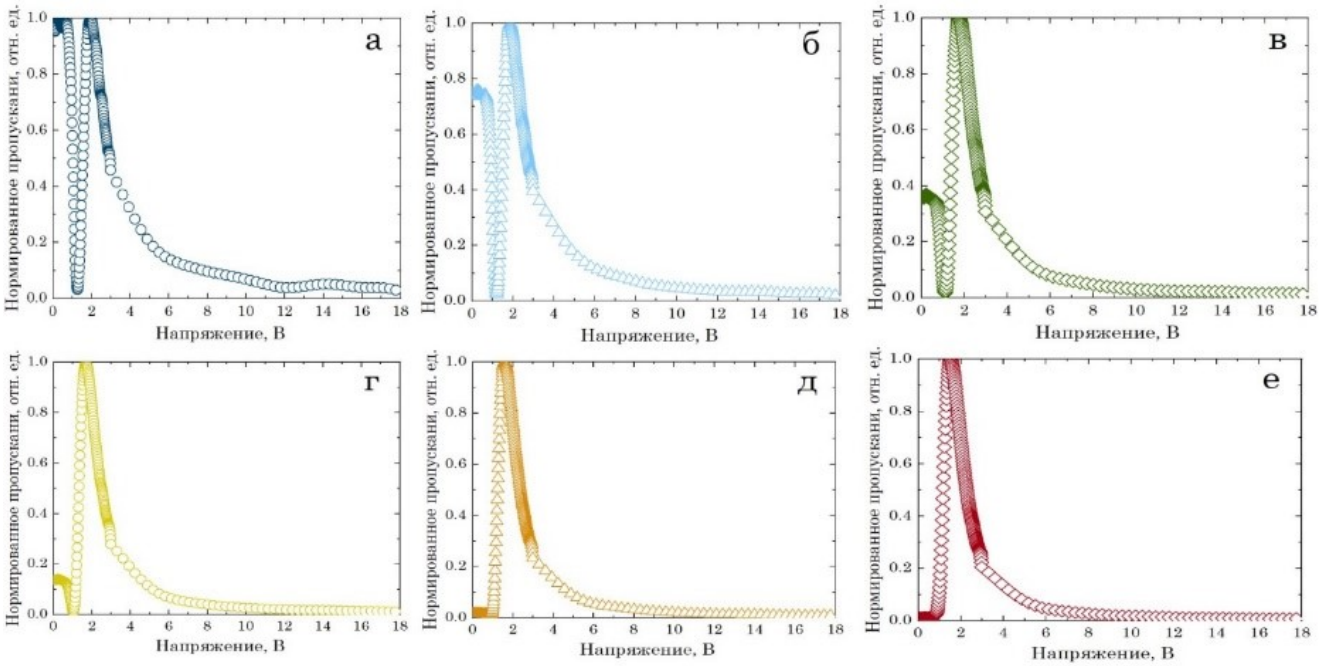


Рис. 1. Вольт-контрастная характеристика ЖК-1289 при температуре 303 К и длинах волн: а. 480,1 нм; б. 500,2 нм; в. 532,2 нм; г. 562 нм; д. 600,2 нм; е. 632,9 нм

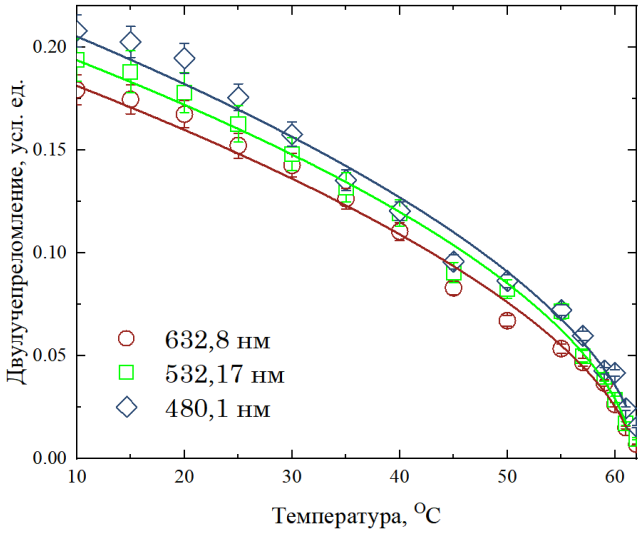


Рис. 2. Зависимость двулучепреломления от температуры для длин волн: 632,8 нм; 532,17 нм; 480,1 нм

Литература

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 202368839. Российская Федерация Программа для автоматического измерения и расчета электрооптических параметров жидкокристаллических материалов / Н. С. Паращук [и др.]; № 2023687917*;* заявл. 15.12.2023; опубл. 21.12.2023.
2. *Kurilov A. D.* [et al.]. Concentration-dependent dielectric and electro-optical properties of composites based on nematic liquid crystals and CdS: Mn quantum dots // Soft Matter. 2023. V. 19 (11). P. 2110–2119.
3. *Chausov D. N.* [et al.]. Electro-optical performance of nematic liquid crystals doped with gold nanoparticles // Journal of Physics: Condensed Matter. 2020. V. 32(39): 395102.

УДК 519.876.5

Исследование структуры ударной волны в газовой смеси на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана

***С. С. Ситников*[1,2], *Ф. Г. Черемисин*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[3]Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»

Исследование ударных волн в разреженных газах имеет большое значение в науке и технике [1,2]. Кроме того, получение структуры ударной волны является одной из ключевых классических задач кинетической теории [3]. В настоящей работе предлагается подход к численному моделированию ударных волн в разреженных газовых смесях, основанный на прямом решении кинетического уравнения Больцмана.

По степени разрежения газа выделяют свободномолекулярный, переходный и гидродинамический режимы течения. Для моделирования ударных волн в переходном режиме обычно применяют метод прямого статистического моделирования или различные методы, основанные на решении модельных кинетических уравнений. Оба подхода имеют известные ограничения по применимости и точности моделирования [4]. В данной работе расчет структуры ударной волны осуществляется на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана [5], которое описывает поведение термодинамической системы во всех режимах течения и подходит для исследования процессов, происходящих в ударной волне на масштабах порядка длины свободного пробега молекул. Для решения системы уравнений Больцмана применяется метод расщепления по физическим процессам [6]. При решении задачи релаксации вычисление интеграла столкновений осуществляется консервативным проекционным методом [7] с использованием интегральных сеток Коробова. Для повышения точности моделирования выполняется пересчет столкновений, дающих отрицательные вклады в узлы импульсной сетки, симметричным проекционным методом [8]. При высоком отношении молекулярных масс компонентов смеси вычисление интеграла столкновений осуществляется с использованием пятиточечной схемы проецирования [9]. В качестве потенциала взаимодействия молекул используется модель твердых сфер.

Рассматривается плоская ударная волна, распространяющаяся в бинарной газовой смеси. Задача одномерная. Перейдем в систему отсчета волнового фронта. Ось X направим по течению газа перпендикулярно фронту ударной волны. Здесь и далее физические величины с индексами 1 и 2 относятся к газовой смеси перед и за ударной волной соответственно. Макроскопические величины компонентов газовой смеси до и после ударной волны связаны соотношениями Рэнкина–Гюгонио:

$$\frac{n_2^i}{n_1^i}=\frac{u_1}{u_2}=\frac{(\gamma+1)M^2}{(\gamma-1)M^2+2},$$
$$\frac{T_2}{T_1}=\frac{\left(2\gamma M^2-(\gamma-1)\right)\left((\gamma-1)M^2+2\right)}{(\gamma+1)^2M^2} \qquad (3)$$

где n_1^i и n_2^i — концентрации i-го компонента бинарной смеси, $i=\overline{\alpha,\beta}$, u_1, u_2 и T_1, T_2 — скорости и температуры газовой смеси, соответственно, γ — показатель адиабаты, равный $5/3$ для смеси одноатомных газов, M — число Маха, $u_1=Mc_1$, где $c_1=\sqrt{\gamma kT_1\dfrac{\sum_i n^i}{\sum_i m^i n^i}}$ — скорость звука в невозмущенном газе. Область счета $x\in(-L,L)$, где $L>0$ достаточно велико, чтобы считать функции распределения компонентов на границе максвелловскими. На границе области счета ставятся условия $f^i(x=-L)=f_1^i$, $f^i(x=L)=f_2^i$, где f_1^i, f_2^i — функции распределения до и после ударной волны, соответственно. Структура ударной волны получается, как результат временной эволюции начального разрыва $f^i(x)=\begin{cases}f_1^i, -L\le x\le 0\\ f_2^i, 0<x\le L\end{cases}$.

Моделирование проводилось для различных значений числа Маха и отношений молекулярных масс и концентраций компонентов смеси. При расчетах диаметры молекул $d^{\alpha} = d^{\beta}$, $T_1^{\alpha} = T_1^{\beta}$. Размер области счета составлял $L = 10$ длин свободного пробега молекул в невозмущенном газе (до ударной волны), шаг по пространству $h_x = 0.1$ длины свободного пробега, шаг по времени $h_t = 1.875 \cdot 10^{-4}$ времен свободного пробега молекул, размер интегральной сетки Коробова $N_v = 10^6$. На рис. 1 представлены полученные распределения макропараметров вдоль фронта ударной волны для различных значений числа Маха, концентраций и молекулярных масс компонентов газовой смеси.

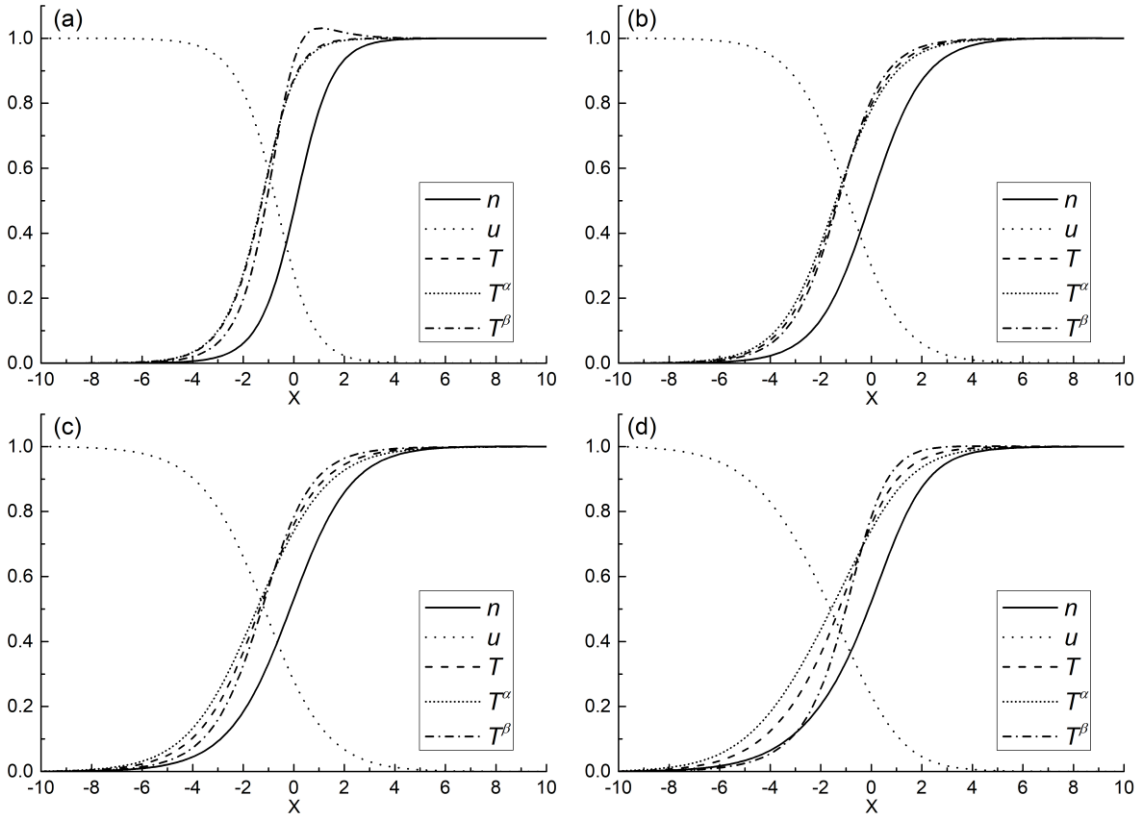


Рис. 1. Распределения макропараметров вдоль фронта ударной волны при $M = 3$, $\frac{m^{\alpha}}{m^{\beta}} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^{\alpha}}{n_1^{\beta}} = \frac{9}{1}$, $M = 2$, $\frac{m^{\alpha}}{m^{\beta}} = \frac{1}{2}$, $\frac{n_1^{\alpha}}{n_1^{\beta}} = 1$, $M = 2$, $\frac{m^{\alpha}}{m^{\beta}} = \frac{1}{4}$, $\frac{n_1^{\alpha}}{n_1^{\beta}} = 1$, $M = 3$, $\frac{m^{\alpha}}{m^{\beta}} = \frac{1}{10}$, $\frac{n_1^{\alpha}}{n_1^{\beta}} = 1$

Для удобства величины приводятся нормированными на соответствующие значения на границе области счета:

$$\tilde{n} = \frac{n - n_1^{\alpha} - n_1^{\beta}}{n_2^{\alpha} + n_2^{\beta} - n_1^{\alpha} - n_1^{\beta}}, \tilde{u} = \frac{u - u_2}{u_1 - u_2},$$
$$\tilde{T} = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}, \tilde{T}^{\alpha,\beta} = \frac{T^{\alpha,\beta} - T_1}{T_2 - T_1} \quad (4)$$

Литература

1. *Cao Z., White C. M., Kontis K.* Numerical investigation of rarefied vortex loop formation due to shock wave diffraction with the use of rorticity // Physics of Fluids. 2021. V. 33(6): 067112. DOI: 10.1063/5.0054289.
2. *Sharipov F., Dias F. C.* Ab initio simulation of planar shock waves // Computers & Fluids. 2017. V. 150. P. 115-122. DOI: 10.1016/j.compfluid.2017.04.002.
3. *Dodulad O. I., Tcheremissine F. G.* Computation of a shock wave structure in monatomic gas with accuracy control // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2013. V. 53(6). P. 827–844. DOI: 10.1134/s0965542513060055.
4. *Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1998. V. 27(3). P. 657-706. DOI: 10.1063/1.556019.
5. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.

6. *Аристов В. В., Черемисин Ф. Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Доклады АН СССР. 1976. Т. 231. № 1. С. 49–52.
7. *Додулад О. И.* [и др.]. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56. № 6. С. 89–105. DOI: 10.7868/S0044466916060119.
8. *Черемисин Ф. Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343. DOI: 10.1134/S0965542506020138.
9. *Anikin Yu. A.* [et al.]. Method of calculating the collision integral and solution of the Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom // International Journal of Computer Mathematics. 2014. V. 92(9). P. 1775–1789. DOI: 10.1080/00207160.2014.909033.

УДК 519.876.5

Моделирование разделения смеси газов в многоступенчатом микронасосе методами кинетической теории

***Я. М. Жихарев*[1,2], *Ф. Г. Черемисин*[1,3], *Ю. Ю. Клосс*[1,2]**

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

Целью настоящей работы является моделирование микроустройства без движущихся частей, течение разреженных газов внутри которых происходит за счет разницы температур. В данной работе рассматривается симметричный газовый насос с последовательностью тонких пластин внутри. Размеры устройства составляют несколько десятков длин свободного пробега, стороны пластин нагреты до разных температур. Их различие приводит к тому, что разные компоненты смеси движутся с разной скоростью, что в свою очередь вызывает различное отношение концентраций в разных частях сосуда и, как следствие, разделение смеси.

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m_i}\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{x}} = \int \left(f_i' f_j' - f_i f_j\right) \left|\frac{\boldsymbol{p}_i}{m_i} - \frac{\boldsymbol{p}_j}{m_j}\right| bdbd\varepsilon d^3\boldsymbol{p}_j. \qquad (1)$$

Для описания поведения газов внутри устройства используется кинетическое уравнение Больцмана [1], которое для i-й компоненты смеси можно записать в виде (1). Численное решение уравнения осуществляется при помощи схемы расщепления первого порядка уравнения переноса и задача релаксации попеременно для каждой компоненты смеси. Решение задачи релаксации осуществляется с помощью консервативного проекционного метода [2], а решение левой части с помощью явной разностной схемы.

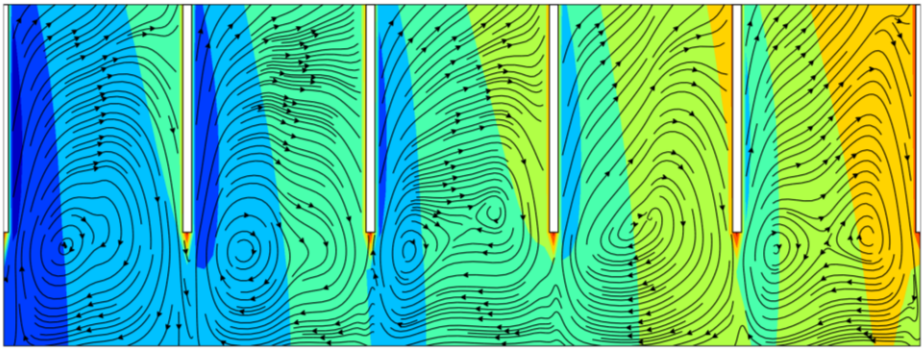


Рис. 1. Структура течений и распределение концентрации легкого газа внутри устройства

Были проведены расчеты для систем с различным числом пластин. Расчеты проводились до установления постоянных отношений концентраций газов на концах устройства. Геометрические размеры системы, толщина пластин, расстояние между ними, расстояние до оси симметрии были подобраны таким образом, чтобы величина разделения получалось наибольшей. При установлении течений наблюдается формирования вихрей между пластинами (рис. 1). На протяжении всех расчетов массы газов внутри системы оставалось постоянными с машинной точностью.

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов ЦОД НИЦ «Курчатовский институт» (http://computing.nrcki.ru/).

Литература

1. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
2. *Додулад О. И.* [и др.]. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // ЖВМ и МФ. 2016. Т. 56. № 6. С. 1008–1024.

УДК 544.25; 538.9

Вязкоупругие свойства тридецилата холестерола с наночастицами азот-допированного малослойного графита

***Р. Н. Кучеров*[1,2], *А. Д. Курилов*[1,2], *А. И. Смирнова*[3], *Н. В. Усольцева*[3], *М. М. Кузнецов*[2], *Д. Н. Чаусов*[1,2]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Государственный университет просвещения
[3]Ивановский государственный университет

Впервые изучено влияние наночастиц азот-допированных малослойных графитовых фрагментов (N-МГФ) на реологические свойства холестерического жидкого кристалла тридецилата холестерола (Х-20) в условиях изменения сдвигового деформационного воздействия и изменения температуры системы. ЖК матрица Х-20 обладает полиморфизмом: смектическая-А фаза (SmA) и хиральная нематическая фаза (N*). Наночастицы N-МГФ имеют форму многослойного прямоугольника с размерами порядка 20 нм и количеством слоев от 4 до 8 [1].

Исследование реологических свойств производилось с использованием прецизионного реометра Anton Paar 102e (Австрия) в осцилляционном режиме с использованием измерительной геометрии типа: плоскость/плоскость.

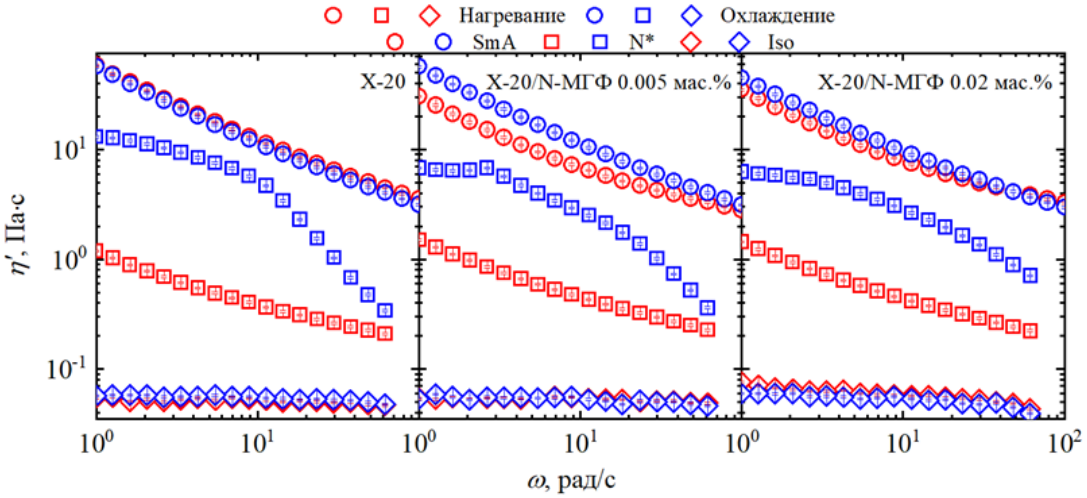


Рис 1. Частотные зависимости сдвиговой вязкости композиций на основе Х-20 и азот-допированного малослойного графита, полученные в различных фазах (SmA — 345 К, N* — 356 К, Iso — 363 К)

При добавлении в матрицу Х-20 наночастиц N-МГФ происходит сдвиг фазовых переходов в сторону повышения температуры. Это следствие изменения параметра порядка молекул ЖК вблизи поверхности наночастиц [2]. Которые, встраиваясь между холестерическими «слоями», берут на себя функцию структурных звеньев в распределении поля директора ЖК. Вследствие этого происходит изменение соотношения вязкостных и упругих свойств системы в мезоморфном состоянии. Установлено, что добавление наночастиц N-МГФ высокой концентрации позволяет расширить возможность работы образцов в хиральной нематической фазе при скоростях сдвига больших (около 60–100 рад/с), чем для чистой смеси (рис. 1). При этом сравнение с работой по исследованию вязкоупругих свойств системы Х-20 с малослойными графитовыми фрагментами (МГФ), позволяет определить, что ориентационные свойства наночастиц при допировании азотом уменьшаются. Подобное явление можно объяснить уменьшением удельной

площади N-МГФ по сравнению с МГФ [3] (примерно на 30–33%). Описание полученных данных при помощи структурной реологической модели [4] позволило установить параметры, позволяющие сделать вывод об агрегации композиций по сравнению с чистой смесью. Полученные данные могут быть использованы для управления реологическими свойствами мезогенов в условиях температурного воздействия при их использовании в механических системах.

Работа выполнена с финансовой поддержкой Минобрнауки РФ (проект № FZZM-2023-0009 для Ивановского государственного университета). Авторы выражают благодарность Д.Н. Столбову за предоставление азот-допированных малослойных графитовых фрагментов для исследования.

Литература

1. *Stolbov D. N.* [et al.]. Influence of different types of carbon nanoflakes on tribological and rheological properties of plastic lubricants Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2022. V. 30(1). P. 177–184.
2. *Chausov D. N.* [et al.]. Mesomorphism, dielectric permittivity, and ionic conductivity of cholesterol tridecylate doped with few-layer graphite fragments Journal of Molecular Liquids. 2023. V. 374: 121139.
3. *Столбов Д. Н.* [и др.]. Синтез и функционализация малослойных графитовых фрагментов // Российский университет в неустойчивом мире: глобальные вызовы и национальные ответы. 2019. С. 24–29.
4. *Кирсанов Е. А., Матвеенко В. Н.* Неньютоновское поведение структурированных систем. — М.: Техносфера, 2016.

Секция фундаментальных основ многомасштабного атомистического моделирования

Председатель: Г. Э. Норман (д. ф.-м. н., профессор)

Зам. председателя: Н. М. Щелкачев (д. ф.-м. н., доцент)

Секретарь: И. Д. Федоров

Дата: 03.04.2024 и 04.04.2023 Время: 10:00

УДК 532.64

Новый алгоритм для расчета контактного угла бинарных смесей в нанопорах

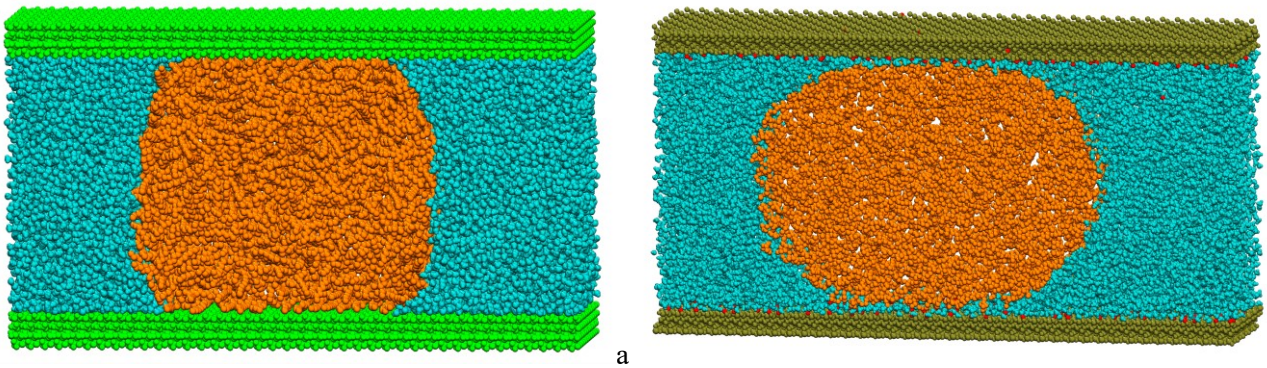
***А. А. Семенчук*[1], *И. В. Копаничук*[1,4], *Н. Д. Кондратюк*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[4]АНО «Институт искусственного интеллекта»

Поверхностные явления определяют поведение жидкостей в пористых средах и на смачиваемых поверхностях. Правильный учет этих явлений лежит в основе точных континуальных моделей [1]. Контактный угол является ключевой величиной, дающей количественную характеристику поверхностных явлений.

В настоящее время не существует общей теории, позволяющей описывать и предсказывать поведение бинарных смесей в нанопорах. Ранее уже изучался вопрос поверхности в случае полностью не смачивающих жидкостей [2]. В данной работе будет представлено обобщение этой теории для произвольного контактного угла, которая будет лежать в основе нового алгоритм для определения величины контактного угла по профилю плотности.

Для валидации теории использовались методы численного моделирования (молекулярная динамика). Были рассмотрены системы, состоящие из смеси н-декана и воды на подложках из кальцита (рис. 1*а*) и мусковита (рис. 1*б*). В результате моделирования и применения нового алгоритма получились следующие результаты: для системы на подложке из кальцита контактный угол — 127º, в литературе приводятся результаты 122º и 116º [3]; в случае системы с подложкой из мусковита угол — 164º, что очень хорошо согласуется с литературой — 163º [4]. Эти результаты показывают корректность разработанной теории и эффективность нового алгоритма.



а б

Рис. 1. Смесь н-декана (оранжевый) и воды (голубой) на подложке из кальцита (*а*) и мусковита (*б*)

В будущем теоретическая модель будет также проверена на данных, полученных в результате классического DFT. Как дальнейшее обобщение теории планируется рассмотреть случаи с учетом разной

энергии взаимодействия фаз, с учетом молекулярной структуры вещества и получить аналитические формулы для случая динамического контактного угла.

Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Соглашение 075-02-2021- 1316 от 30.09.2021).

Литература

1. *Nichita D. V.* Volume-based phase stability analysis including capillary pressure // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 492. P. 145–160.
2. *Kopanichuk I. V.* [et al]. The shape of the liquid-liquid interface for oil/water mixtures in slit pores // Colloids Surf., A. 2020. V. 601: 124884.
3. *Zhao J., Yao G., Wen D.* Salinity-dependent alterations of static and dynamic contact angles in oil/brine/calcite systems: a molecular dynamics simulation study // Fuel. 2020. V. 272: 117615.
4. *Jiménez-Ángeles F., Firoozabadi A.* Contact angle, liquid film, and liquid–liquid and liquid–solid interfaces in model oil–brine–substrate systems // J. Phys. Chem. C. 2016. V. 120. № 22. P. 11910–11917.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Моделирование взаимодействия флавинмононуклеотида (ФМН) с кислородом в белке miniSOG

А. Р. Блинов*[1], *Б. Л. Григоренко

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Фотодинамическая терапия — один из самых многообещающих методов лечения онкологических заболеваний. Реактивные формы кислорода (РФК) являются агентом подобной терапии; источником для них могут служить в том числе флуоресцентные белки и их хромофоры [1]. К ним относится и miniSOG, представляющий собой небольшой, флавинсодержащий, флуоресцентный белок, способный генерировать синглетный кислород при возбуждении синим светом [2]. В литературе существует серия работ, посвященная получению мутантов белка с повышенным квантовым выходом синглетного кислорода [3, 4]. Известно, что при интенсивном облучении флавинмононуклеотид (ФМН), связанный miniSOG, разрушается, а квантовый выход синглетного кислорода повышается. Это объясняется деградацией ФМН до люмихрома (ЛХ), который предположительно является более эффективным генератором РФК. Исходя из этого, на роль агентов фотодинамической терапии можно предложить мутанты miniSOG, которые будут способствовать деградации ФМН до ЛХ, а также с высокой константой связывать новообразованный хромофор.

Таким образом, интерес представляет не только изучение структуры возбуждения системы ФМН-кислород, которая является источником РФК, но и процесса деградации хромофора, что ведет к образованию более эффективного генератора РФК. В данной работе нами были охарактеризованы возбужденные состояния системы окисленный ФМН-кислород, а также возможные пути деградации ФМН в miniSOG в присутствии кислорода.

Энергии возбужденных состояний были рассчитаны с помощью методов MCSCF и MCQDPT2. Переходы 1→3 (444 нм) и 1→5 (379 нм) хорошо согласуются с положением основных полос спектра поглощения хромофора в miniSOG (447 нм и 365 нм соотвественно). К состояниям, включающим синглетный кислород, относятся состояния 6 и 7; их энергии поглощения составляют 3.5 эВ.

С помощью комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики (КМ/ММ) были промоделированы два пути деградации ФМН, сопровождающиеся образованием формилметилфлавина в одном случае и люмихрома, формальдегида и перекиси водорода в другом. Молекулярно-механическая часть системы была описана с помощью параметров силового поля CHARMM36; квантово-механическая часть описывалась на уровне теории функционала плотности (PBE0/D3). Определено решающее значение конформации хромофора на выбор предпочтительного пути реакции. Таким образом, можно предположить возможность создания мутантных форм miniSOG, селективных по отношению к одной из конформаций ФМН, что позволит отчасти контролировать процесс деградации ФМН до ЛХ.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М. В. Ломоносова при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-13-00012).

Литература

1. *Sai D. L.* [et al.]. Tailoring Photosensitive ROS for Advanced Photodynamic Therapy // Exp Mol Med. 2021. V. 53. P. 495–504.
2. *Shu X.* [et al.]. A Genetically Encoded Tag for Correlated Light and Electron Microscopy of Intact Cells, Tissues, and Organisms // PLOS Biology. 2011. V. 9: e1001041.
3. *Westberg M* [et al.]. Rational Design of an Efficient, Genetically Encodable, Protein-Encased Singlet Oxygen Photosensitizer // J. Am. Chem. Soc. 2015. V. 137. P. 1632–1642.
4. *Westberg M.* [et al.]. No Photon Wasted: An Efficient and Selective Singlet Oxygen Photosensitizing Protein // J. Phys. Chem. B. 2017. V. 121. P. 9366–9371.

УДК 53.083.71

Алгоритм CROP для ускорения сходимости итерационной процедуры решения уравнений релятивистского метода связанных кластеров

***А. С. Румянцев*[1], *А. В. Олейниченко*[1,2], *А. В Титов*[1], *А. В. Зайцевский*[1,3]**

[1]НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Теоретический потенциал исследования материалов с лантаноидами и актиноидами, как правило, ограничивается теорией функционала плотности и нерелятивистскими подходами для описания периодических структур. Перечисленные методы в большинстве случаев не позволяют получать надежных результатов, так как волновые функции для соединений f-элементов часто имеют ярко выраженный многоконфигурационный характер, а для спектра состояний характерна высокая плотность низколежащих электронных состояний. Релятивистские методы связанных кластеров для многомерного модельного пространства (MR-CC) позволяют решить эту проблему.

Данная работа посвящена реализации вычислительных алгоритмов, позволяющих улучшить сходимость итерационных процедур решения амплитудных уравнений метода связанных кластеров.

На сегодняшний день для ускорения сходимости итерационной процедуры широко используется алгоритм DIIS. Однако при рассмотрении моделей с высокой вычислительной сложностью, в частности, явно учитывающих вклады трехкратных возбуждений, данный алгоритм требует большого объема оперативной памяти для хранения значений амплитуд на предыдущих итерациях. Для решения данной проблемы в работе [1, 2] был предложен алгоритм CROP. В рамках этого подхода итеративное подпространство может быть сведено к трехмерному без потери скорости сходимости относительно DIIS. Метод CROP был реализован в пакете программ EXP-T [3]. Продемонстрировано, что метод CCSD с использованием DIIS и CROP обладает одинаковой скоростью сходимости, при этом для алгоритма CROP хранилось значения амплитуд с трех последних итераций по сравнению с десятью для DIIS. Тесты проводились для молекул H_2O и AcO^+, графики изображены на рис. 1 и рис. 2 соответственно.

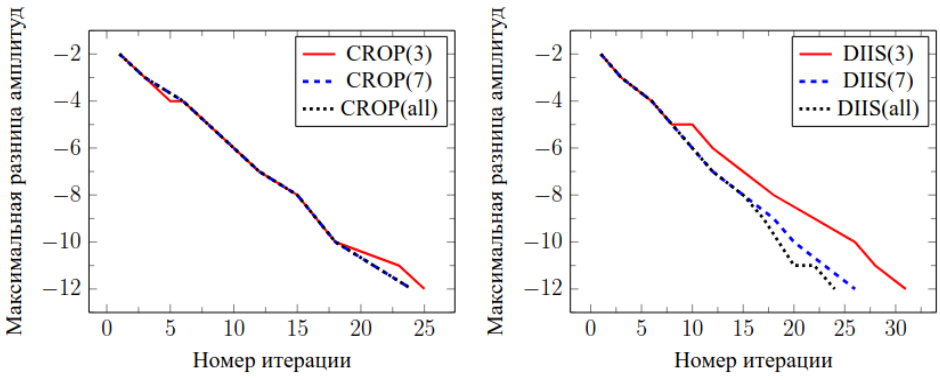


Рис. 1. Сходимость CCSDT с CROP и DIIS для H2O (логарифмический масштаб по оси *y*)

Из графиков видно, что для достижения максимального ускорения сходимости для алгоритма CROP необходимо хранить последних итераций в несколько раз меньше, чем для алгоритма DIIS.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-10019).

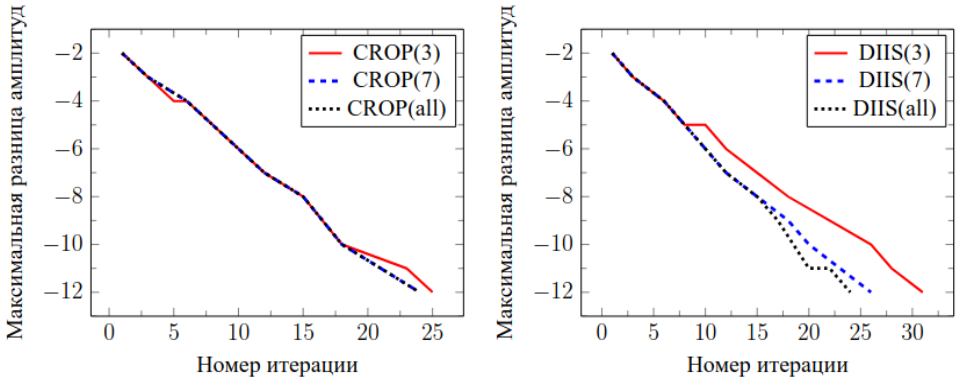


Рис. . Сходимость CCSD с CROP и DIIS для AcO^+ (логарифмический масштаб по оси y)

Литература

1. *Ziolkowski M.* [et al.]. An efficient algorithm for solving nonlinear equations with a minimal number of trial vectors: Applications to atomic-orbital based coupled cluster theory // J. Chem. Phys. 2008. V. 128(20): 204105.
2. *Ettenhuber P., Jørgensen P.* Discarding information from previous iterations in an optimal way to solve the coupled cluster amplitude equations // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. P. 1518–1524.
3. *Oleynichenko A. V., Zaitsevskii A. V., Eliav E.* Towards High Performance Relativistic Electronic Structure Modelling: The EXP-T Program Package // Commun. Comput. Inf. Sci. 2020. V. 1331. P. 375–386.

УДК 539

Молекулярно-динамическое моделирование распространения звуковых волн в воде

***А. А. Шуплецова*[1,2], *В. В. Стегайлов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

В жидкостях на высоких (терагерцовых) частотах имеет место так называемый «быстрый» звук — явление, известное с 1980-х годов, интерес к которому не ослабевает до сих пор [1, 2]. В воде «быстрый» звук значительно превышает обычный, что было обнаружено экспериментально, и вызывает особенный интерес как, возможно, еще одна аномалия воды. Молекулярно-динамическое моделирование является полезным инструментом для количественного анализа звуковых волн [3], и может помочь в описании таких аномальных явлений на микроскопическом уровне.

В данной работе было проведено классическое молекулярно-динамическое моделирование для системы из 128 000 молекул воды при нормальных условиях с использованием модели TIP4P/Ice [4] в пакете программ LAMMPS. Звуковые волны генерировались синусоидально колеблющейся стенкой с одной стороны расчетной ячейки и гасились термостатом Ланжевена на противоположной стороне. Для разных значений частоты и амплитуды сигнала построены профили скорости, проведен анализ формы сигнала при различных параметрах. Скорость звука в системе определяется непосредственно из преобразования Фурье формы волны. Результаты сопоставляются с экспериментальными значениями [1].

Литература

1. *Kajihara Y.* [et al.]. Experimental observation of mesoscopic fluctuations to identify origin of thermodynamic anomalies of ambient liquid water // Physical Review Research. 2023. V. 5(1): 013120.
2. *Бражкин В. В., Данилов И. В., Циок О. Б.* Тайны воды и других аномальных жидкостей: «медленный» звук, релаксирующие сжимаемость и теплоемкость (Миниобзор) // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2023. Т. 117(11). С. 840–856.
3. *Asano Y., Watanabe H., Noguchi H.* Molecular dynamics simulation of soundwave propagation in a simple fluid // The Journal of Chemical Physics. 2020. V. 153(12): 124504.
4. *Abascal J.* [et al.]. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice // The Journal of chemical physics. 2005. V. 122(23): 234511.

УДК 539.194

Релятивистский метод связанных кластеров для моделирования электронных состояний и свойств систем с открытыми оболочками

***А. В. Олейниченко*[1,2], *А. В. Зайцевский*[1,3], *Л. В. Скрипников*[1,4], *А. С. Румянцев*[1,4], *Ю. В. Ломачук*[1], *Н. С. Мосягин*[1], *Э. Элиав*[5], *А. В. Титов*[1,4]**

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[4]Санкт-Петербургский государственный университет
[5]Тель-Авивский университет (Израиль)

Одним из наиболее перспективных средств неэмпирического моделирования обширных классов низколежащих электронных состояний систем, включающих атомы нижней части периодической таблицы, является релятивистский метод связанных кластеров [1–3]. В частности, версия метода в формулировке для пространства Фока показала себя высокоэффективным средством получения информации об энергетических характеристиках и, с недавних пор, вероятностях электронных переходов [4], что позволяет уверенно использовать этот метод как инструмент решения задач теоретической спектроскопии. Будут рассмотрены современные направления развития методов связанных кластеров для моделирования электронных состояний и свойств систем с открытыми оболочками. Будут изложены как подходы, направленные на увеличение точности моделирования малых молекул посредством учета вкладов трехкратных возбуждений в волновые функции [5], так и недавно созданные подходы, основанные на кластерном моделировании и позволяющие с высокой точностью предсказывать локализованные свойства твердых тел и материалов [6].

В качестве примера приложения разработанных теоретических моделей и прикладных пакетов программ [7] в ходе выступления будут представлены недавние расчеты релятивистским методом связанных кластеров систем электронных состояний малых молекул (ThO, AcF [8], рис. 1) и вероятностей $E1$-переходов между ними; полученные данные позволили впервые провести экспериментальное спектроскопическое исследование последней молекулы. Также будут представлены результаты пилотного приложения метода связанных кластеров к моделированию локальных возбуждений на примесных центрах Ce^{3+} и Th^{3+} в кристаллической матрице минерала ксенотима YPO_4 (рис. 2).

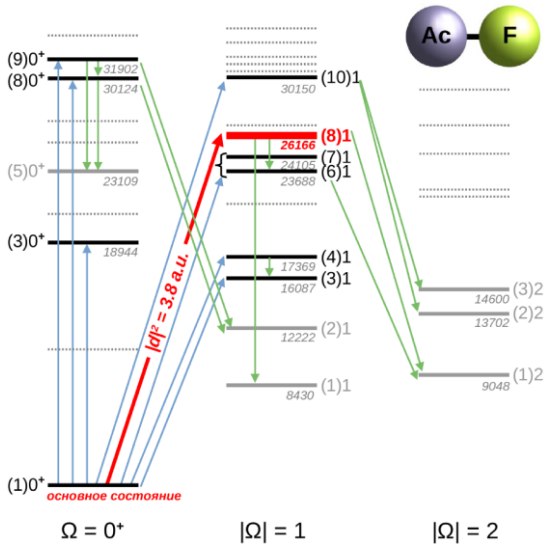
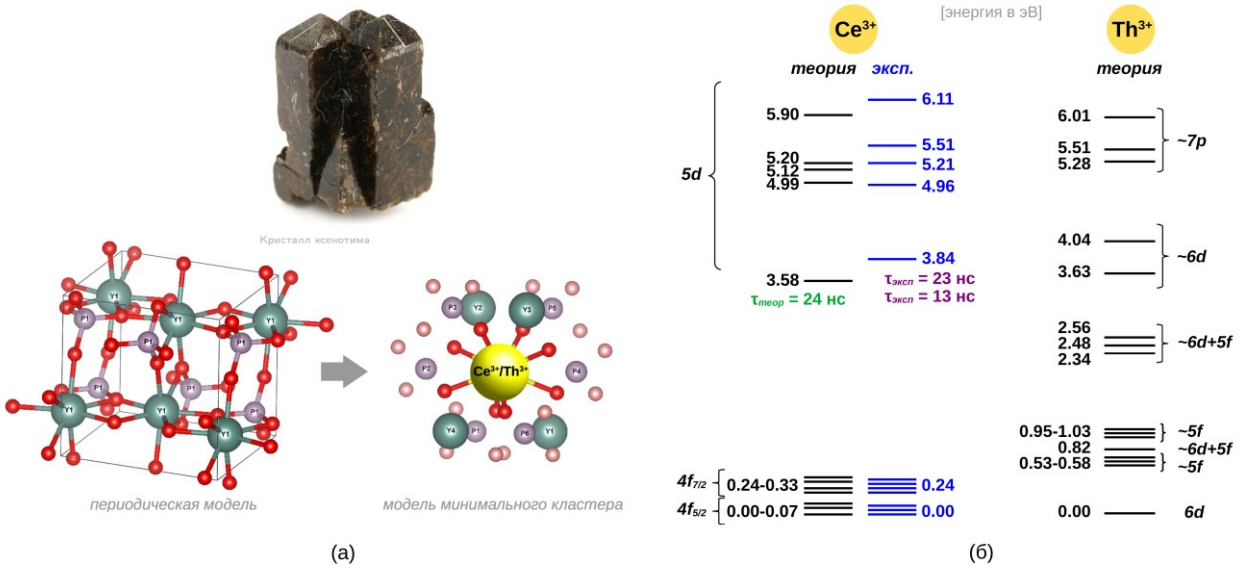


Рис. 1. Электронные уровни энергии (в $см^{-1}$) молекулы AcF, вычисленные релятивистским методом связанных кластеров для пространства Фока, и разрешенные переходы между ними (показаны стрелками) [8]. Изученный в эксперименте электронный переход выделен красным цветом

В завершение планируется рассмотреть дальнейшие пути развития метода связанных кластеров для многомерных модельных пространств, которые представляются наиболее перспективными с точки зрения повышения его вычислительной эффективности, расширения области применимости и круга доступных для моделирования типов электронных состояний.

Работа А. В. О., А. В. З., Ю. В. Л., Н. С. М. и А. В.Т. в НИЦ «Курчатовский институт»–ПИЯФ по разработке новых версий метода связанных кластеров, а также моделированию примесных центров в кристалле ксенотима была выполнена за счет гранта Российского научного фонда №20-13-00225, https://rscf.ru/project/20-13-00225/.



(а) (б)

Рис. 2. Моделирование локальных возбуждений на примесных ионах Ce^{3+} и Th^{3+} в матрице ксенотима YPO_4 методом связанных кластеров [6]: *а* — кластерная модель примесного центра в кристалле конструируется с использованием подстраиваемых-под-соединение псевдопотенциалов; *б* — рассчитанные (обозначены черным цветом) и найденные из эксперимента (обозначены синим) уровни энергии примесных ионов в YPO_4 и времена жизни низшего из 5*d*-состояний иона Ce^{3+}.

Литература

1. *Visscher L., Eliav E., Kaldor U.* Formulation and implementation of the relativistic Fock-space coupled cluster method for molecules // J. Chem. Phys. 2001. V. 115. P. 9720–9720.
2. *Lyakh D. I.* [et al.]. Multireference Nature of Chemistry: The Coupled-Cluster View // Chem. Rev. 2012. V. 112. P. 182–243.
3. *Eliav E.* [et al.]. Relativistic Fock-space coupled cluster method: theory and recent applications // Comprehensive Computational Chemistry. 2024. V. 3. P. 79–93.
4. *Олейниченко А. В.* [et al.]. Прямой расчет переходных матричных элементов в релятивистской теории связанных кластеров // Оптика и спектроскопия. 2023. Т. 131. № 11. С. 1549–1555.
5. *Oleynichenko A. V.* [et al.]. Relativistic Fock space coupled cluster method for many-electron systems: non-perturbative account for connected triple excitations // Symmetry. 2020. V. 12(7): 1101.
6. *Oleynichenko A. V.* [et al.]. Compound-tunable embedding potential method to model local electronic excitations on *f*-element ions in solids: Pilot relativistic coupled cluster study of Ce and Th impurities in yttrium orthophosphate, YPO_4 // Phys. Rev. B. 2024. V. 109: 125106.
7. *Oleynichenko A., Zaitsevskii A., Eliav E.* Towards high performance relativistic electronic structure modelling: the EXP-T program package // Commun. Comp. Inf. Sci. 2020. V. 1331. P. 375–386.
8. *Skripnikov L. V.* [et al.]. *Ab initio* study of electronic states and radiative properties of the AcF molecule // J. Chem. Phys. 2023. V. 159: 124301.

УДК 538.931

Нарушение соотношения Стокса–Эйнштейна при высоких давлениях

***Б. И. Никитюк*[1,2], *В. В. Писарев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Точный расчет вязкости жидких углеводородов в экстремальных условиях необходим для моделирования гидродинамических процессов в смазочных жидкостях, топливах, нефтяных месторождениях и других задачах индустрии, для которых затруднено проведение экспериментов. Для описания вязкости

жидкостей при высоких давлениях разработано несколько типов эмпирических моделей [1], но ни один из них не способен точно предсказать реологические свойства всех типов углеводородов. Одним из открытых вопросов является резкий рост вязкости при достижении определенного давления для ряда веществ. Для исследования этого процесса на атомарном уровне применим метод молекулярной динамики (МД).

Так как прямой расчет вязкости в МД требует длительных расчетов, суммарной длинной до микросекунд [2, 3], часто для расчета вязкости используется соотношение Стокса-Эйнштейна, связывающее вязкость молекулярной жидкости с ее коэффициентом самодиффузии через гидродинамический радиус молекул:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}, \tag{1}$$

где T — температура, η — вязкость, D — коэффициент самодиффузии, r — гидродинамический радиус молекулы.

Однако известно, что соотношение Стокса–Эйнштейна нарушается для ряда веществ в экстремальных условиях. Экспериментально установлено нарушение этого соотношения для воды [4], стеклообразующих металлических жидкостей [5] и углеводородов [6]. Для этих веществ на температуре, близкой к температуре стеклования происходит переход в дробно-степенной режим соотношения Стокса-Эйнштейна:

$$D \propto T\eta^{-\xi}, \tag{1}$$

где степень ξ — эмпирическая величина, обычно лежащая в диапазоне 0,6–0,9.

Существует несколько моделей этого явления, связывающих его с образованием гетероструктуры в жидкости в процессе стеклования [6,7], образованием групп высокомобильных молекул [8] или с разделением характерных времен динамики микро- и макропроцессов [9], однако не предложено единой модели. Эти модели являются качественными и не предсказывают температуру перехода или степень соотношения.

Так как углеводороды при высоких давлениях могут формировать стекла [10], для корректного предсказания вязкости требуется исследование применимости соотношения Стокса-Эйнштейна. Так, резкий рост вязкости углеводорода может быть связан с переходом в дробно-степенной режим соотношения и началом процесса стеклования. В ряде работ, рассматривающих нарушение соотношения в широком диапазоне температур и давлений, также отмечается необходимость учета дополнительной зависимости от давления [4,11].

В данной работе получена вязкость 1-метилнафталина $C_{11}H_{10}$ в полноатомном потенциале COMPASS [12] при температуре 323 К в диапазоне давлений до 600 МПа. Для расчета вязкости используется формула Грина-Кубо и метод временной декомпозиции [13]. На рис. 1 показан переход зависимости Стокса-Эйнштейна в дробно-степенной режим. В работе также рассматривается молекулярный механизм перехода. Исследование ведется методом МД с помощью пакета LAMMPS [14].

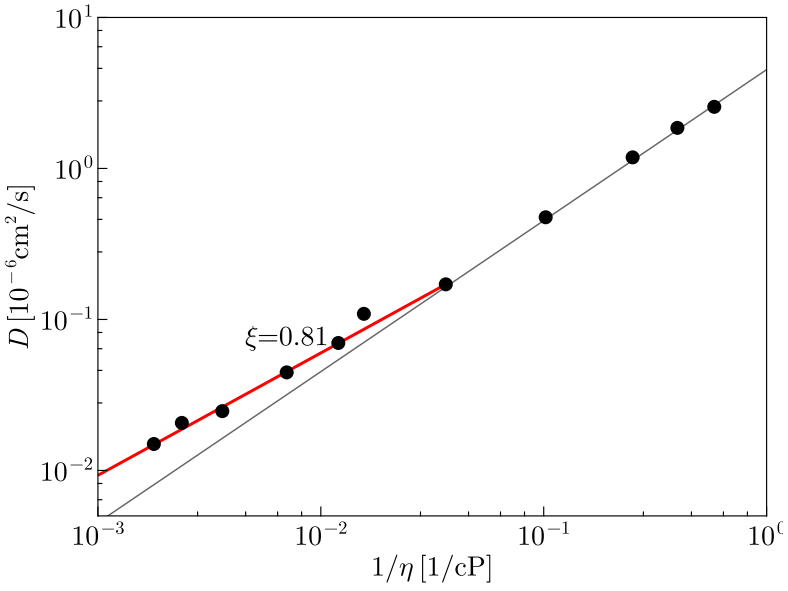


Рис. 1. Зависимость коэффициента самодиффузии от обратной вязкости для 1-метилнафталина

Литература

1. *Baled H. O.* [et al.]. Viscosity models for pure hydrocarbons at extreme conditions: A review and comparative study // Fuel. 2018. V. 218. P. 89–111.
2. *Kondratyuk N. D., Pisarev V. V., Ewen J. P.* Probing the High-Pressure Viscosity of Hydrocarbon Mixtures Using Molecular Dynamics Simulations // J. Chem. Phys. 2020. V. 153(15): 154502.
3. *Toraman G.* [et al.]. Impact of Ad Hoc Post-Processing Parameters on the Lubricant Viscosity Calculated With Equilibrium Molecular Dynamics Simulations // Lubricants 2023. V. 11(4): 183.
4. *Mussa A.* [et al.]. Viscosity and Stokes-Einstein Relation in Deeply Supercooled Water Under Pressure. // J. Chem. Phys. 2023. V. 159(15): 151103.
5. *Chen F. Z.* [et al.]. Breakdown of the Stokes–Einstein Relationship and Rapid Structural Ordering in CuZrAl Metallic Glass-forming Liquids // J. Chem. Phys. 2021. V. 155(10): 104501.
6. *Ngai K. L.* [et al.]. Flow, Diffusion and Crystallization of Supercooled Liquids: Revisited. // J. Chem. Phys. 2000. V. 112(4). P. 1887–92.
7. *Ediger M. D.* Spatially heterogeneous dynamics in supercooled liquids. // Annu. Rev. Phys. Chem. 2000. V. 51. P. 99–128.
8. *Pan S.* [et al.]. Structural Origin of Fractional Stokes-Einstein Relation in Glass-Forming Liquids. // Sci. Rep. 2017. V. 7(1): 39938.
9. *Kawasaki T., Kang K.* Identifying Time Scales for Violation/Preservation of Stokes-Einstein Relation in Supercooled Water // Sci. Adv. 2017. V. 3(8): e1700399.
10. *Jadhao V., Robbins M. O.* Probing Large Viscosities in Glass-formers With Nonequilibrium Simulations. // PNAS. 2017. V. 114(30). P. 7952–57.
11. *Cao Q., Wang. P.* Stokes-Einstein Relation in Liquid Iron-nickel Alloy up to 300 GPa. // J. Geophys. Res. Solid Earth 2017. V. 122(5). P. 3351–3363.
12. *Sun H.* COMPASS: An ab initio force-field optimized for condensed-phase applications—Overview with details on alkane and benzene compounds // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102(38). P. 7338–7364.
13. *Zhang Y.* [et al.]. Reliable Viscosity Calculation from Equilibrium Molecular Dynamics Simulations: A Time Decomposition Method // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11(8). P. 3537–46.
14. *Plimpton S*. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117(1). P. 1–19.

УДК 544.034

Изучение характеристик смесей органических жидкостей методами молекулярной динамики

***В. И. Дещеня*[1,2], *Н. Д. Кондратюк*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Определение вязкости жидкостей необходимо для широкого спектра прикладных задач в нефтегазовой и смазочной промышленностях, а также для исследования процессов стеклования [1, 2]. Однако эксперименты требуют больших временных и финансовых затрат, особенно в случае построения концентрационных зависимостей и исследования влияния температуры, давления.

В качестве альтернативного способа получения вязкости может использоваться атомистическое моделирование, позволяющее во многих случаях дать достаточно точную оценку транспортных коэффициентов [3]. В частности, метод молекулярной динамики является универсальным инструментом, позволяющим изучать сложные системы при разных условиях на атомарном уровне. Методики расчета транспортных коэффициентов изучены и отработаны [4], что гарантирует получение достоверных результатов. Точность при этом определяется моделью межатомного взаимодействия.

Для органических жидкостей существует набор классических потенциалов межатомного взаимодействия. Они точно прогнозируют геометрию молекул, локальную структуру и уравнения состояния, фазовое равновесие. В случае вязкости потенциалы могут давать ошибку в 1,5–2 раза. Уточнение классических потенциалов для молекулярных систем может быть проведено путем перебора параметров межмолекулярного взаимодействия и построения корреляции параметры — целевое свойство [5]. Но этот подход в случае вязкости оказывается вычислительно затратным.

В данной работе проводится уточнение потенциала межатомного взаимодействия для бинарной смеси органических жидкостей 1-деканола и н-ундекана. Процедура заключается в масштабировании энергетических коэффициентов леннард-джонсовского взаимодействия для точного воспроизведения вязкостей чистых жидкостей и последующим расчете вязкости смесей при различных пропорциях компонент. В работе

проводится сравнение с концентрационной зависимостью, полученной с помощью машинно-обучаемой модели для предсказания вязкости бинарных смесей MixProp [6], а также с экспериментальными данными.

Расчеты проведены на суперкомпьютерах «Десмос2 ОИВТ РАН и “Soft Cluster” МФТИ. Исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021).

Литература

1. *Bair S.* The viscosity at the glass transition of a liquid lubricant // Friction. 2019. V. 7. P. 86–91.
2. *Bell I. H., Dyre J. C., Ingebrigtsen T. S.* Excess-entropy scaling in supercooled binary mixtures // Nat. Commun. 2020. V. 11(1): 4300.
3. *Deshchenya V. I.* [et al.]. Molecular dynamics study of sucrose aqueous solutions: From solution structure to transport coefficients // J. Mol. Liq. 2022. V. 367: 120456.
4. *Кондратюк Н. Д., Писарев В. В.* Теоретические и вычислительные подходы к предсказанию вязкости жидкостей // УФН. 2023. Т. 193. С. 437–461.
5. *Befort B. J.* [et al.]. Machine learning directed optimization of classical molecular modeling force fields // J. Chem. Inf. Model. 2021. V. 61(9). P. 4400–4414.
6. *Bilodeau C.* [et al.]. Machine learning for predicting the viscosity of binary liquid mixtures // Chem. Eng. J. 2023. V. 464: 142454.

УДК 532.72

Влияние протонного переноса на диффузию ионов H_3O^+ и OH^- в воде

В. Д. Негодин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В работе исследуется эффект протонного переноса в воде и в паре. Изучается его влияние на коэффициенты диффузии молекул воды и ионов H_3O^+ и OH^- в воде. Для исследования используется метод молекулярной динамики, в качестве потенциала взаимодействия выбран реакционный потенциал ReaxFF [1], особенностью которого является возможность моделирования химических реакций, к которым также относится и протонный перенос, за счет динамического образования связей. Сравниваются результаты, полученные с помощью двух наборов коэффициентов потенциала ReaxFF: water-2017 [2] и CHON-2017_weak [3]. Моделируется система молекул воды в жидком и газообразном состоянии без добавления ионов и с добавлением ионов H_3O^+ или OH^-.

Для вычисления коэффициентов диффузии использовалось соотношение Эйнштейна:

$$6Dt = \langle |\Delta \boldsymbol{r}(t)|^2 \rangle,$$

где D — коэффициент диффузии, t — время, $\langle |\Delta \boldsymbol{r}(t)|^2 \rangle$ — средний квадрат смещения молекулы или иона относительно начального положения от времени. Усреднение проводилось по всем молекулам в системе и по независимым начальным положениям молекул. Моделировалась конечная система в периодических граничных условия, из-за чего появляется поправка к коэффициенту диффузии относительно бесконечно большой системы [4]. Для нахождения коэффициента диффузии в бесконечной системе, проводился расчет для нескольких размеров системы, а затем проводилась экстраполяция к бесконечно большому размеру ячейки моделирования.

Для жидкой фазы воды расчет коэффициентов самодиффузии молекул воды и коэффициентов диффузии ионов H_3O^+ и OH^- в воде проводился вдоль всей кривой насыщения воды. Произведено сравнение с экспериментальными данными по значениям коэффициентов самодиффузии воды для широкого диапазона температур и давлений [5, 6], обнаружена хорошая согласованность за исключением области низких температур (рис. 1). Также произведено сравнение с экспериментальными значениями коэффициентов диффузии ионов H_3O^+ и OH^- в воде при нормальных условиях [7] — расчетные значения отклоняются от экспериментальных в 1,5 и в 3 раза соответственно для ионов H_3O^+ и OH^-. Вдоль всей кривой насыщения воды коэффициенты диффузии ионов превышают коэффициенты самодиффузии воды, это связано с механизмом протонного переноса, который вносит вклад в диффузионное движение ионов. Было замечено, что температурные зависимости всех коэффициентов диффузии имеют вид прямых в аррениусовских координатах (рис. 2*а*).

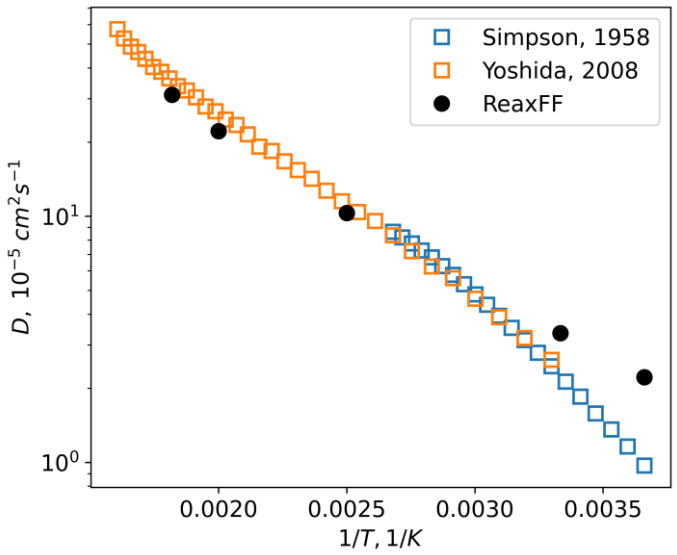


Рис. 1. Сравнение расчетных значений (черные круги) с экспериментальными значениями [5, 6] (синие и оранжевые квадраты соответственно) в аррениусовских координатах

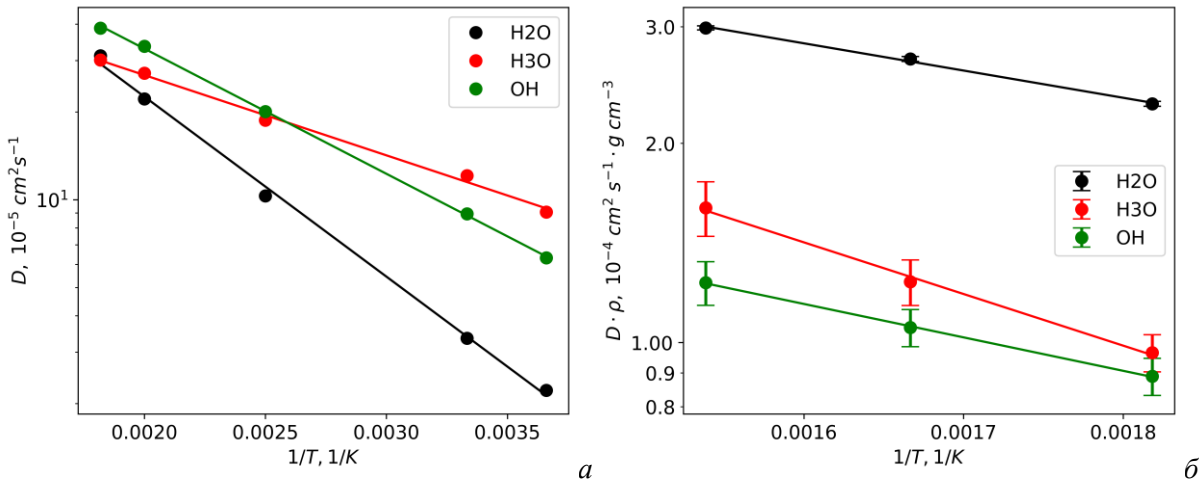


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициентов диффузии молекул воды и ионов H_3O^+ и OH^- в жидкой воде (*а*) и температурная зависимость коэффициентов диффузии, умноженных на плотность системы, в паре (*б*). Зависимости представлены в аррениусовских координатах. Крестами отмечены погрешности в одно стандартное отклонение

В паре проведены аналогичные расчеты. Получено, что при всех рассмотренных значениях температуры и давления коэффициенты самодиффузии воды превышают коэффициенты диффузии ионов. Это может быть связано с эффектом гидратации ионов в паре. Замечено, что температурные зависимости коэффициентов диффузии в паре не ложатся на прямые в аррениусовских координатах, однако это свойство выполняется для температурной зависимости коэффициента диффузии, умноженного на плотность системы (рис. 2*б*).

Для исследования причин снижения коэффициентов диффузии ионов в паре по сравнению с коэффициентами самодиффузии воды было проведено исследование частоты протонных перескоков между ионом H_3O^+ или OH^- и молекулой воды в паре и исследована радиальная функция распределения молекул воды с центром в молекуле воды или ионе. Обнаружено, что протонный перескок в паре происходит значительно реже, чем в жидкости, то есть в паре процесс движения иона практически только диффузионный. Исследование плотности молекул воды рядом с ионом показало, что гидратационная оболочка иона отличается от гидратационной оболочки молекулы воды, что также влияет на диффузионные свойства иона в воде.

Выражаю благодарность Г. Э. Норману и А. В. Ланкину за постановку задачи и научное руководство.

Литература

1. *Van Duin A. C. T.* [et al.] ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons // J. Phys. Chem. A. 2001. V. 105. P. 9396−9409.
2. *Zhang W., Van Duin A. C. T.* Second-Generation ReaxFF Water Force Field: Improvements in the Description of Water Density and OH-Anion Diffusion // J. Phys. Chem. B. 2017. V. 121. P. 6021−6032.
3. *Zhang W., Van Duin A. C. T.* Improvement of the ReaxFF Description for Functionalized Hydrocarbon/Water Weak Interactions in the Condensed Phase // J. Phys. Chem. B. 2018. V. 122(14). P. 4083–4092.
4. *Yeh I.-C., Hummer G.* System-Size Dependence of Diffusion Coefficients and Viscosities from Molecular Dynamics Simulations with Periodic Boundary Conditions // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108(40). P. 15873–15879.
5. *Simpson J. H., Carr H. Y.* Diffusion and Nuclear Spin Relaxation in Water // Phys. Rev. 1958. V. 111(5). P. 1201–1202.
6. *Yoshida K., Matubayasi N., Nakahara M.* Self-diffusion coefficients for water and organic solvents at high temperatures along the coexistence curve // J. Chem. Phys. 2008. V. 129: 214501.
7. *Light T. S.* [et al.] The Fundamental Conductivity and Resistivity of Water // Electrochem. Solid-State Lett. 2005. V. 8. P. E16−E19.

УДК 539

Определение равновесных концентраций H и H_2 в расплаве Pb при помощи первопринципных метадинамических расчетов

***Г. В. Хнкоян*[1,2], *В. С. Николаев*[1,2], *В. В. Стегайлов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

На текущий момент перспективным для атомной энергетики является введение в эксплуатацию реакторов на быстрых нейтронах для замыкания топливного цикла. В таких реакторах в качестве охладителя первого контура используются тяжелые металлические теплоносители, в частности свинец. Для предотвращения негативных эффектов коррозии и растворения стали вследствие непосредственного контакта со свинцовым теплоносителем в расплав вводится кислород для образования и поддержания защитной оксидной пленки на поверхностях сталей.

Водород может попадать в первый контур как при его чистке — введении водорода в объем теплоносителя для связывания кислорода и последующего растворения твердофазных оксидов PbO, так и в составе молекул воды в зоне теплообмена первого контура со вторым. По причине того, что водород активно связывает кислород, важен контроль его состояния в объеме теплоносителя [1].

Первопринципные молекулярно-динамические (МД) расчеты позволяют изучать поведение отдельных атомов и молекул в расплаве свинца [2]. Нами для расчетов используется программный пакет VASP. В моделировании рассматривается расчетная ячейка, содержащая 64 атома расплава свинца и 2 атома водорода.

Для определения термодинамически равновесных концентраций атомов и молекул водорода в свинцовом расплаве нами рассчитывается свободная энергия образования молекулы H_2 в расплаве свинца. Для расчета свободной энергии образования используется подход моделирования методом метадинамики [3], который заключается в добавлении адаптивного потенциала в МД расчет. Полученный при этом добавочный потенциал позволяет восстановить профиль свободной энергии вдоль выбранной коллективной переменной. В качестве коллективной переменной нами выбрано расстояние между атомами водорода r_{H-H}.

Для температуры $T = 800K$ при помощи указанного подхода рассчитан профиль свободной энергии вдоль r_{H-H} и получена оценка термодинамически равновесных концентраций молекулярной H_2 и атомарной H форм примеси в расплаве свинца.

Литература

1. *Martynov P. N.* [et al.]. Water and hydrogen in heavy liquid metal coolant technology // Progress in Nuclear Energy. 2005. V. 47(1-4). P. 604-615.
2. *Li D.* [et al.]. Dynamic process of H-controlled oxygen concentration in LBE: A first-principles study // Journal of Nuclear Materials. 2015. V. 467. P. 181–185.

3. *Bussi G., Laio A.* Using metadynamics to explore complex free-energy landscapes // Nature Reviews Physics. 2020. V. 2(4). P. 200–212.

УДК 538.931

Моделирование двойного электрического слоя в концентрированных растворах электролитов методами молекулярной динамики

Г. К. Вандышев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Двухфазные системы привлекают внимание исследователей на протяжении значительного времени, представляя собой объект глубокого научного интереса. Одним из главных примеров таких систем являются мембраны, которые широко распространены в науке и промышленности. Важным свойством границы двух фаз является формирование двойного электрического слоя (ДЭС). Сохранение электрохимического потенциала влечет за собой перераспределение заряда, следовательно изменение электростатического потенциала. Это несет за собой появление новых физико-химических свойств. В них входят разность химических потенциалов ионов, подвижность ионов, а также кинетика перехода между фазами.

Простейшая система для изучения ДЭС является граница двух водных растворов электролитов с разной концентрацией. Для описания электрокинетических свойств растворов широко распространена модель идеального раствора. Она описывает электрохимический потенциал свободных ионов по формуле

$$\mu_i = \mu_{0,i} + kTln(c_i) + ez_i\varphi, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана, T — температура (K), φ — электростатический потенциал, c_i — концентрация и z_i — зарядовое число i свободного иона. Из этого определения, в частности, следует распределение Больцмана для ионов. Применимость данного приближения лежит в области маленьких концентраций электролитов. Если данное выражения для химического потенциала объединить с уравнением Пуассона, получается уравнение Пуассона–Больцмана, которое является центральным в описании ДЭС. В линейном приближении выводится радиус Дебая — характерное расстояние, на которое распространяется поле от ионов. В сравнении со средним расстояниям между ионами он должен быть больше. Целью данной работы является изучение применимости модели идеального раствора при больших концентрациях электролитов.

Метод молекулярной динамики хорошо себя показала при расчете свойств водных растворов. Объектом исследования являлся ДЭС на границе двух водных растворов ионов LiCl, с разной концентрацией Li. Изучение свойств ионов Li^+ актуальная задача, так как они входят в состав аккумуляторов [1] и других систем. Граница описывалась стенкой не проницаемой для ионов Li и проницаемой для остальных атом и ионов. Стенка описывалась потенциалом Леннард-Джонса. Моделировалось ~22000 молекул воды. В ходе работы для атомарного моделирования использовался программный пакет LAMMPS. Для описания потенциала межатомного взаимодействия был выбран OPLS-AA [2]. Для воды использовалась модель SPCE [3]. Константы и заряды для ионов были взяты из [4]. При моделировании использовались граничные условия и обрезка потенциала Леннард-Джонса. Шаг интегрирования 1 фс.

В начале система выходила на равновесие в микро каноническом ансамбле NPT с заданными температурой (300 K) и давлением (1 атм.). Равновесие определялось несколькими способами. Выход на равновесную константу кинетической и потенциальной энергий. Равенство средних кинетических энергий всех типов атомов с учетом их степеней свободы, так как в модели используется вода с жесткими связями. Платообразный вид профиля плотности для каждого из компонентов системы в отдалении от границы раздела.

Из-за симметрии системы по осям x и y, система должна быть изотропна по данным осям. Рассчитывался профиль потенциала в направлении z — перпендикулярное селективной стенке. Для получения из молекулярно-динамической модели электростатического потенциала использовалось уравнение Пуассона, которое решалось в периодических граничных условиях метод ряда Фурье.

Была реализована программа, вычисляющая по траекториям молекулярной динамики усредненный профиль кулоновского потенциала. Путем приближения потенциала внутри ячейки функцией вида $\varphi = Aexp(-z/C)$ были получены значения дебаевского радиуса свободных ионов для некоторых значений концентрации. Также были проведены сравнения с теоретическими значениями. Результаты показаны на рис. 1. На нем видно, что при уменьшении концентрации экспериментальные точки приближаются к теоретическим значениям.

Расчеты проводились на кластерах МФТИ и лаборатории многомасштабного моделирования в физике мягкой материи.

Автор благодарит А. В. Ланкина за постановку задачи и научное руководство, а также Н. Д. Кондратюка и Г. Э. Нормана за техническую помощь и обсуждения.

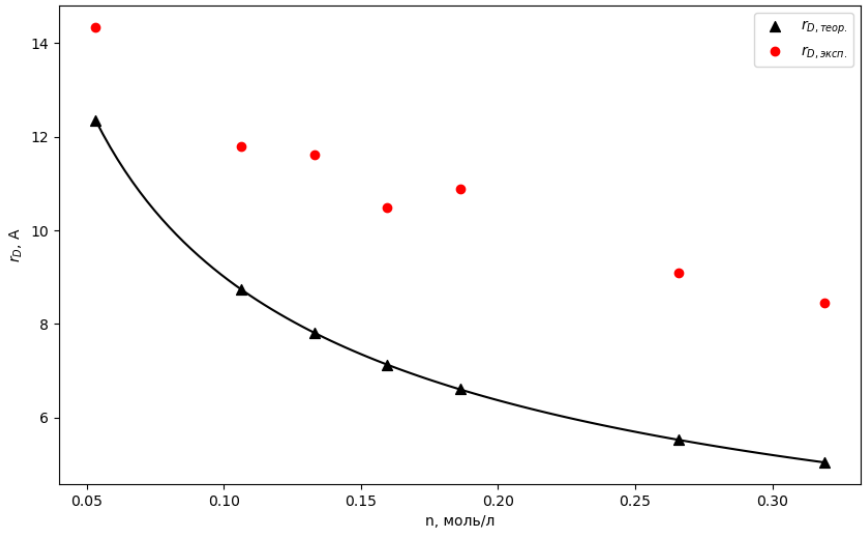


Рис. 1. График зависимости радиуса Дебая в зависимости от концентрации электролитов: теоретические (черный) и экспериментальные (красный) значения

Литература

1. *Gui L., Zhongwei Z., Ahmad G.* Novel approaches for lithium extraction from salt-lake brines: A review // Hydrometallurgy. 2019. V. 187. P. 81–100.
2. *Jorgensen W. L., Maxwell D. S., Tirado-Rives J.* Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. P. 11225–11236.
3. *Sachini P.* [et al.]. Systematic Comparison of the Structural and Dynamic Properties of Commonly Used Water Models for Molecular Dynamics Simulations // J. Chem. Inf. Model. 2021. V. 61(9). P. 4521–4536.
4. *Chandrasekhar J., Spellmeyer D. C., Jorgensen W. L.* Energy component analysis for dilute aqueous solutions of lithium(1+), sodium(1+), fluoride(1-), and chloride(1-) ions // J. Am. Chem. Soc. 1984. V. 106(4). P. 903–910.

УДК 533.9.01

Отклонение от обобщенной теоремы о равнораспределении средней кинетической энергии как естественная мера невзаимности в активной материи

***Д. А. Колотинский*[1,2], *А. В. Тимофеев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Сегодня активная материя является одной из наиболее быстро развивающихся областей исследований. Под названием «активная материя» подразумевается любая совокупность объектов, которые по отдельности используют свободную энергию окружающей среды для своего собственного движения [1]. Активные системы можно наблюдать в живых биологических системах, таких как колонии бактерий, клетки и стаи птиц, или в особых типах неживых систем, таких как пылевая плазма или коллоиды. Особое внимание при изучении активной материи уделяется невзаимным эффектам. Например, взаимодействие между заряженными коллоидными или пылевыми частицами не удовлетворяет третьему закону Ньютона действие=противодействию. Это эффективное нарушение фундаментального принципа объясняется передачей энергии и импульса от неравновесной среды к взаимодействующим частицам [2]. Помимо активной материи, невзаимность во взаимодействиях присуща также неравновесным системам, сетям нейронов и метаматериалам. В свою очередь, возникающая невзаимность на уровне отдельных взаимодействий приводит к нарушению симметрии уже на мезоскопических масштабах.

Например, следствием невзаимности на уровне отдельных взаимодействие является нарушение теоремы о равнораспределении средней кинетической энергии между степенями свободы в равновесной динамической системе. В этом докладе рассматриваются упорядоченные невзаимные системы, в которых силы взаимодействия являются линейной функцией смещений частиц. Мы показываем, как теорема о равнораспределении может быть обобщена на определенный подкласс таких систем, которые носят название псевдо-гамильтоновых [3]. На основе отклонения от этой обобщенной теоремы о равнораспределении мы разработали естественную меру невзаимности для упорядоченных активных систем. Мы демонстрируем работоспособность этой меры на невзаимной системе с тремя степенями свободы. Разработанная мера невзаимности может быть использована для определения того, насколько активная система далека от псевдо-гамильтоновости, и является шагом к построению теории невзаимных систем в целом. Кроме того, мы показываем, что для цепочечной структуры активных частиц эта мера невзаимности растет с увеличением вклада дальнодействующих взаимодействий.

Литература

1. *Giannozzi P.* [et al.]. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 46(29): 465901.
2. *Bowic M. J.,* [et al.]. Symmetry, thermodynamics, and topology in active matter // Phys. Rev. X. 2022. V. 12(1): 010501.
3. *Hariprasad M.* [et al.]. Self-sustained non-equilibrium co-existence of fluid and solid states in a strongly coupled complex plasma system, Sci. Rep. 2022. V. 12(3):13882.
4. *Ivlev A. V.* [et al.]., Statistical mechanics where newton's third law is broken // Phys. Rev. X. 2015. V. 5(6): 011035.

УДК 538.9

Проблемы ускорения молекулярно-динамических вычислений на гибридных суперкомпьютерах

***Д. Г. Павлов*[1,2], *В. В. Стегайлов*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

С появлением новых технологий в сфере высокопроизводительных вычислений, возникает естественная необходимость в адаптации алгоритмов, решающих задачу молекулярной динамики, к новым требованиям и возможностям [1, 2]. Несмотря на то, что алгоритмы, решающие задачу молекулярной динамики с теоретически оптимальной алгоритмической сложностью, были сформулированы уже несколько десятилетий назад [3], зачастую скорость алгоритма подвержена замедлению в константу раз из-за неэффективного использования особенностей железа, таких как SIMT-архитектура и кэш-локальность.

Современные суперкомпьютеры, используемые для решения задачи молекулярной динамики, представляют из себя множество узлов, на каждом из которых установлен один или более графический ускоритель, причем оперативной памяти на каждом отдельном узле иногда недостаточно, чтобы вместить всю систему. Эти особенности не всегда учитываются при разработке программных пакетов, решающих задачу молекулярной динамики.

В данной работе приведен анализ последних трендов в развитии высокопроизводительных вычислений. Особое внимание уделено графическим ускорителям и их программной поддержке. В рамках работы был создан прототип молекулярно-динамического кода, демонстрирующего эффективное взаимодействие с GPU-ускорителями, и приведено сравнение с существующими решениями. Развитие данного проекта позволит более эффективно пользоваться ресурсами отечественных суперкомпьютеров при решении научных задач средствами атомистического моделирования.

Литература

1. *Páll S.* [et al.] Tackling Exascale Software Challenges in Molecular Dynamics Simulations with GROMACS // Lect. Notes Comput. Sci. 2015. V. 8759. P. 3–27.
2. *Kondratyuk N.* [et al.] GPU-accelerated molecular dynamics: State-of-art software performance and porting from Nvidia CUDA to AMD HIP // Int. J. High Perform. Comput. Appl. 2021. V. 35. P. 312-324.
3. *Plimpton S.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117(1). P. 1–19.

УДК 533.9.01

Анализ динамики пылевых частиц в криогенном плазменно-пылевом эксперименте

***В. С. Николаев*[1,2], *А. В. Тимофеев*[1,2], *Д. Д. Тюбаев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

В экспериментах с пылевой плазмой движение пылевой системы обычно записывается на видеокамеру, в удачных случаях удается определить положения отдельных частиц в кадре и восстановить их траектории. В данной работе проводится анализ таких траекторий, полученных в ходе одного из экспериментов с пылевой плазмой тлеющего разряда гелия [1], с помощью построения распределения частиц по скоростям и парной корреляционной функции.

Для определения координат частиц в кадре используется обученная авторами нейронная сеть BeadNet [2]. Для дальнейшего восстановления траекторий используется алгоритм MAGIK [3].

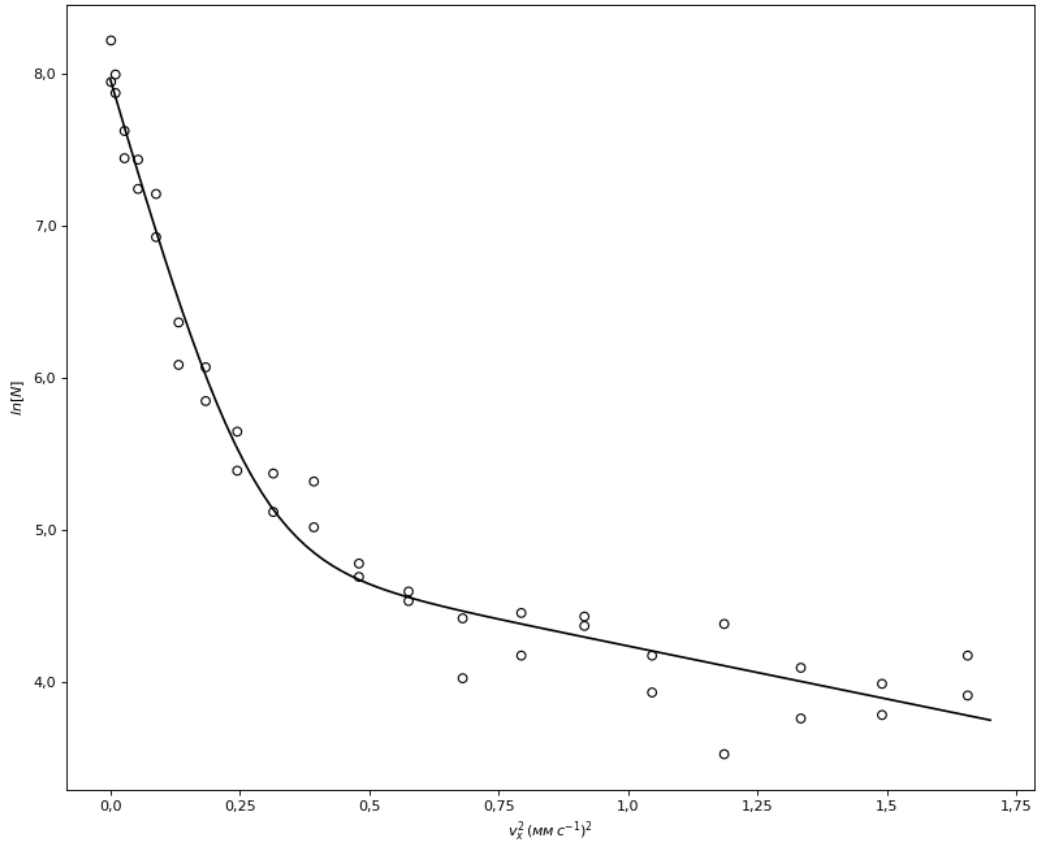


Рис. 1. Функция распределения частиц по горизонтальной компоненте скорости. Экспериментальные данные (кружки) аппроксимируются линейной комбинацией максвелловских распределений (сплошная линия)

Функция распределения частиц по скоростям представлена на рис. 1. Величины, откладываемые по осям выбраны таким образом, чтобы в этих координатах максвелловское распределение имело бы линейный вид. Экспериментальная зависимость не максвелловская. Это можно объяснить тем, что в эксперименте использовалась полидисперсная алмазная пыль, вследствие чего частицы в системе имеют разные массы. В общем случае вид распределения частиц по скоростям зависит от распределения частиц в системе по массе, здесь же для аппроксимации мы используем линейную комбинацию двух максвелловских распределений с двумя разными характерными скоростями, соответствующими двум разным массам.

$$N(v_x) = A_1 \exp\left(\frac{-v_x^2}{v_1^2}\right) + A_2 \exp\left(\frac{-v_x^2}{v_2^2}\right).$$

В эксперименте система подсвечивается плоским лазерным ножом конечной ширины (несколько сот мкм), сравнимой с межчастичными расстояниями, и наблюдается картинка двумерного среза системы. Для улучшения радиальной функции распределения используется метод фильтрации частиц по

их яркости, предложенный J. Goree и др. [4]. Гистограмма распределения частиц по яркости, используемая в этом методе, показана на рис. 2. Уровень фильтрации, определяемый данным методом, мы называем оптимальным.

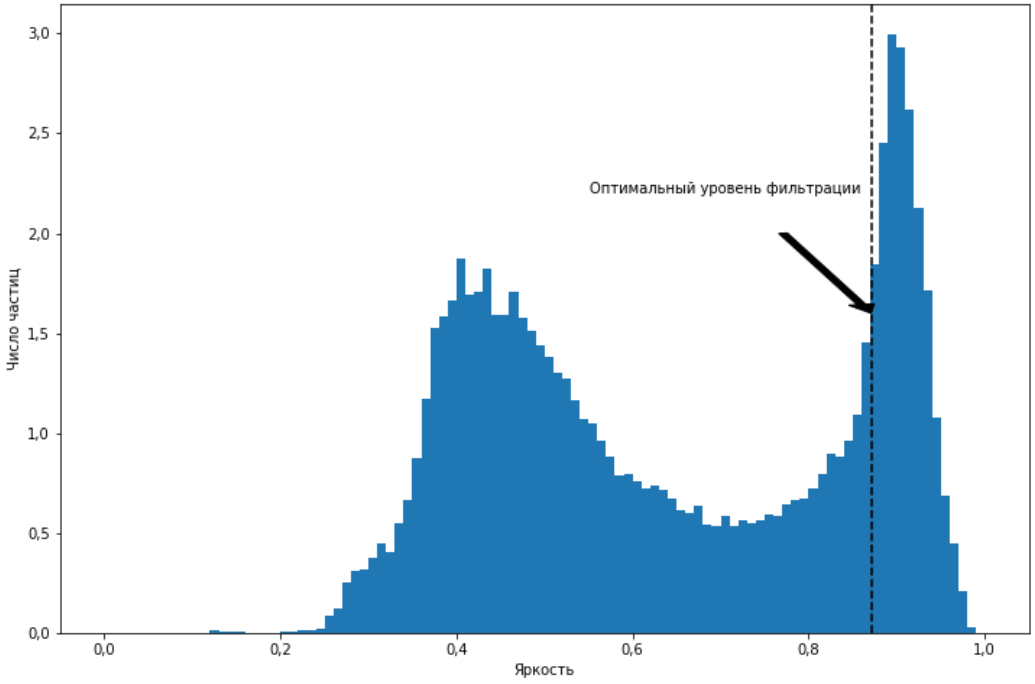


Рис. 2. Гистограмма распределения частиц по яркость их изображения

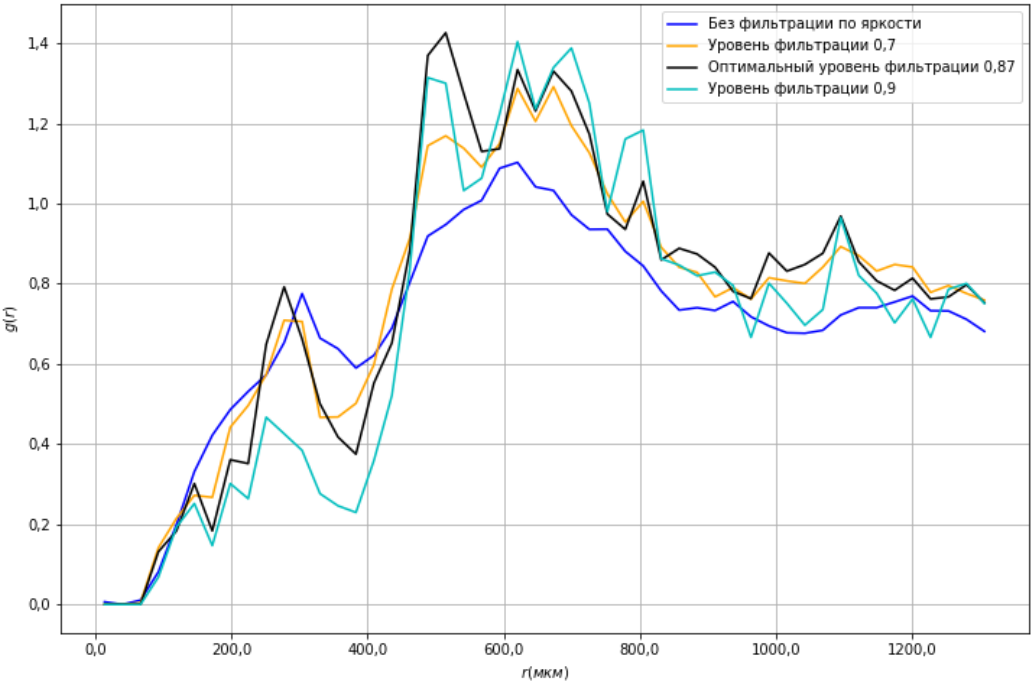


Рис. 3. Двумерная радиальная функция распределения $g(r)$ с фильтрацией по яркости и без нее

Радиальные функции распределения частиц без фильтрации по яркости и с разными уровнями фильтрации приведены на рис. 3. После применения фильтрации самый высокий пик становится более острым, что позволяет уменьшить погрешность в определении его положения.

Зависимости характерных скоростей v_1 и v_2, полученных из функции распределения частиц по скоростям, и среднего межчастичного расстояния a, определяемого по положению первого пика радиальной функции распределения, от температуры стенки газоразрядной трубки T, концентрации гелия n и тока разряда I представлены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Зависимости структурных и динамический характеристик пылевой подсистемы от параметров плазмы

I, мА	n, 10^{15}см$^{-3}$	T, K	Горизонтальная скорость		Вертикальная скорость		a, мкм
			$v_1, \frac{\text{мкм}}{\text{с}}$	$v_2, \frac{\text{мкм}}{\text{с}}$	$v_1, \frac{\text{мкм}}{\text{с}}$	$v_2, \frac{\text{мкм}}{\text{с}}$	
1,01	199	101	280±10	1010±70	331±15	870±50	250±20
1.3	197	104	290±10	1200±100	300±20	720±20	600±100
0.4	139	9.4	540±60	1200±200	500±30	1090 ± 150	340±40
0.4	209	93	263±15	890±70	290±20	730±30	-
0.67	52	20.7	570±30	1400±300	570±60	1200±200	410±50
0.74	54	26.8	570±130	1160±90	470±40	970±40	410±50
0.36	15	72	1510±80	3400±200	-	-	430±20

Литература

1. *Самойлов И. С.* [и др.]. Пылевая плазма в тлеющем разряде гелия в диапазоне температур 5–300 К // ЖЭТФ. 2017. Т. 151. № 3. С. 582–591.
2. *Scherr T.* [et al.]. BeadNet: deep learning-based bead detection and counting in low-resolution microscopy images // Bioinformatics. V. 36(17). P. 4668–4670.
3. *Pineda J.* [et al.]. Geometric deep learning reveals the spatiotemporal fingerprint of microscopic motion // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2202.06355.
4. *Liu B., Goree J., Ruhunusiri S*. Characterization of three-dimensional structure using images // Rev. Sci. Instrum. 2015. V. 86(3). DOI: 10.1063/1.4914468.

УДК 577.322.5, 539.19

Моделирование молекул хлорофилла Chl-a в воде

Е. И. Игольников, В. В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Хлорофилл является основным пигментом, который поглощает свет в видимом диапазоне и передает его энергию для фотосинтеза [1]. Поэтому его изучение представляет большой научный интерес. В работе проводится атомистическое моделирование молекулы хлорофилла типа Chl-a в воде с помощью пакета программ "Gromacs". Моделирование производится в силовом поле Amber 03ff. Параметры для описания молекулы хлорофилла в данном силовом поле были взяты из работы [2], в которой они были получены благодаря квантово-химическим расчетам. Используется модель воды tip4p

В работе исследуется изменение конформационных состояний двух молекул Chl-a в воде с течением времени в зависимости от их начального взаиморасположения и температуры системы. На рис. 1 изображена молекула Chl-a. В ее строении есть гидрофильная часть, представляющая собой **«**углеводородный хвост**»**. Гидрофобная часть молекулы является производным тетрапиррольным соединением с содержанием одного атома магния. Поэтому, находясь в воде, две соседние молекулы хлорофилла стремятся сблизиться своими гидрофобными частями, чтобы уменьшить площадь взаимодействия с окружающими молекулами воды.

В соответствии с влиянием гидрофильных и гидрофобных свойств на поведение молекул в воде было обнаружено сближение и взаимодействие молекул на температурном диапазоне от 297 К до 303 К. Выявлено два различных механизма связывания молекул, исследована зависимость механизма и времени связывания от температуры системы при двух различных начальных расположениях молекул. В одном случае они располагались параллельно, а в другом антипараллельно. На рис. 2 изображено связывание молекул Chl-a. Они сблизились друг к другу и поворачиваются параллельно своими гидрофобными частями.

Для количественного анализа взаимодействия используются коллективные переменные, среднеквадратичное отклонение, радиус инерции. В результате проделанной работы сделаны выводы о влиянии начального расположения молекул на результат их дальнейшего взаимодействия.

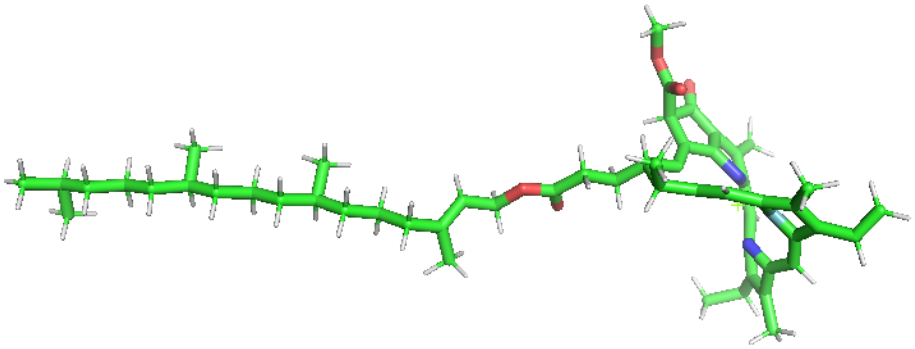


Рис. 1. Визуализация молекулы хлорофилла Chl-a в программе PyMol (молекулы воды не показаны)

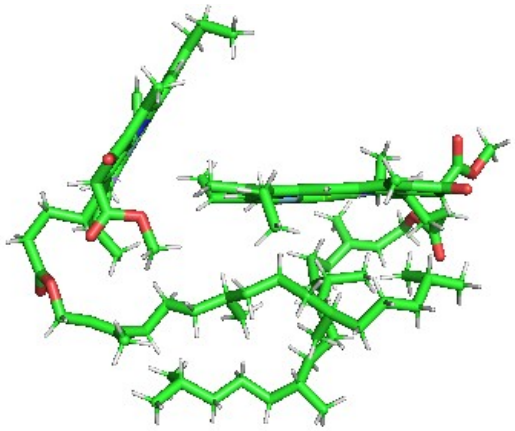


Рис. 2. Взаимодействие двух молекул хлорофилла Chl-a

Литература

1. *Palencar P.* The theoretical study of Photosystem II, Chlorosomes and Flavoprotein Wrb: дис. … д-ра биол. наук. Нове-Гради, 2007.
2. *Zhang L.* [et al.]. Force Field Development for Cofactors in the Photosystem II // Journal of Computational Chemistry. 2012. V. 33(25). P. 1969–1980.

УДК 538.931

Свободная энергия образования точечных дефектов при конечных температурах

***Е. А. Лобашев*[1,2], *Н. А. Фоминых*[1,2], *А. С. Антропов*[1,2], *В. В. Стегайлов*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Высшая школа экономики (национальный исследовательский университет)

Свободная энергия образования дефекта в кристаллической решетке G_f — это важная величина, от которой зависит равновесная концентрация дефектов соответствующего типа. Как правило, для оценки свободной энергии методами МД моделирования рассчитываются потенциальные энергии образования дефектов, а для предсказания температурной зависимости используют гармонический подход. Но если моделирование проводится при температурах, близких к температуре плавления, то G_f может существенно меняться, поэтому температурную зависимость $G_f(T)$ стоит учитывать. Однако ангармонические эффекты могут играть существенную роль в этой зависимости. Термодинамическое интегрирование может точно учесть их, но точность и сходимость этого метода существенно зависит от особенностей его реализации. Кроме того, метод термодинамического интегрирования редко используется для многокомпонентных систем.

Мы провели расчеты $G_f(T)$ для четырех материалов: железа, алюминия, меди и вюстита (FeO) различными методами. Самый простой и наименее точный из них — расчет через фононные спектры в квазигармоническом приближении [1]. Кроме него было использовано три варианта термодинамического

интегрирования по параметру потенциала λ [2, 3], один из которых был предложен впервые, а также термодинамическое интегрирование по температуре [4]. Результаты, полученные разными методами, сравнивались между собой и с литературными данными [3, 4], с которыми было получено согласие. Все методы были проанализированы, выявлены достоинства и недостатки каждого из них и определен наиболее разумный.

Литература

1. *Fultz B.* Vibrational thermodynamics of materials // Prog. in Mat. Sci. 2010. V. 55(4). P. 247–352.
2. *Fominykh N. A., Nikolskiy V. P., Stegailov V. V*. Atomistic model of an oxide film in contact with a liquid metal coolant: Defects concentrations and chemical potentials of dissolved Fe–O // Comp. Mat. Sci. 2023. V. 220: 112061.
3. *Korotaev P., Belov M., Yanilkin A*. Reproducibility of vibrational free energy by different methods // Comp. Mat. Sci. 2018. V. 150. P. 47–53.
4. *Cheng B., Ceriotti M.* Computing the absolute Gibbs free energy in atomistic simulations: Applications to defects in solids // Phys. Rev. B. 2018. V. 97(5): 054102.

УДК: 538.953

Локальный критерий плавления для малых систем

***И. В. Аверин*[1,2], *А. В. Тимофеев*[1,2], *В. С. Николаев*[1,2]**

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

Плавление вещества интересно как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Особый интерес представляют системы, где плавление происходит неоднородно, например, системы заряженных пылевых частиц в ловушке в плазме [1] и металлические наночастицы [2].

Для детального изучения процесса плавления таких систем методом молекулярной динамики необходим чувствительный и надежный критерий, позволяющий локально различать жидкую и кристаллическую фазы. В данной работе в этом качестве рассматривался параметр IDF [3], который вычислялся по следующей формуле:

$$\Delta_{IDF} = \left\langle \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{\langle r_{ij} \rangle} \right\rangle_{ij},$$

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j, $\langle ... \rangle$ — термодинамическое усреднение, $\langle ... \rangle_{ij}$ — усреднение по парам соседних частиц. Соседними мы считали частицы, которые в начальный момент времени находились на расстоянии меньшем радиуса первой координационной сферы, которая определялась из радиальной функции распределения.

Сначала свойства параметра были изучены в однородной неограниченной системе на примере системы частиц Леннард-Джонса в периодических граничных условиях. Он показал линейный рост при нагреве кристалла с резким повышением значения при его плавлении. В жидкости же значение IDF оставалось постоянным вплоть до ее кристаллизации. Универсальность значения в жидкости также была подтверждена с использованием модели случайно блуждающих частиц. IDF продемонстрировал постоянство значения на кривой плавления в широком диапазоне давлений. Также была подробно изучена зависимость параметра IDF от максимального расстояния, на котором частицы считаются соседними. В случае жидкости увеличение этого расстояния приводит к более медленной сходимости, а в случае кристалла к более низким значениям параметра.

Для изучения свойств IDF при неоднородном плавлении были выбраны шаровые наночастицы Леннард-Джонса и алюминия. В случае системы Леннард-Джонса для предотвращения испарения атомов с поверхности наночастицы была добавлена отталкивающая сферическая стенка, которая приводила к небольшому искажению результатов. На рис. 1 представлены радиальные зависимости параметра IDF при разных температурах, на которых четко прослеживается постепенное уменьшение размеров кристаллического ядра вплоть до полного плавления наночастицы.

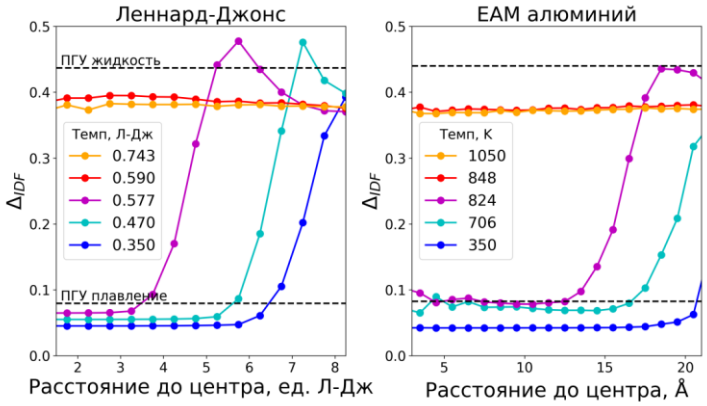


Рис. 1. Радиальные зависимости параметра IDF в шаровых наночастицах Леннард-Джонса (слева) и алюминия (справа) для разных температур, полученные при нагревании изначально кристаллического состояния вплоть до его плавления.

Для молекулярно-динамических расчетов применялся программный пакет LAMMPS, вычисления производились на кластере МФТИ. Программа для вычисления параметра IDF была написана самостоятельно.

Литература

1. *Nikolaev V.S., Timofeev A.V.* Nonhomogeneity of phase state in a dusty plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions // Phys. Plasmas. 2021. V. 28(3): 033704.
2. *Shibuta Y., Suzuki T.* Melting and nucleation of iron nanoparticles: A molecular dynamics study // Chemical Physics Letters. 2007. V. 445. P. 265–270.
3. *Kaelberer J.B., Etters R.D.* Phase transitions in small clusters of atoms // The Journal of Chemical Physics. 1977. V. 66(7). P. 3233–3239.

УДК 544.35.03

Анализ сети водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана методом молекулярной динамики

***И. К. Бакулин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Диоксан является широко распространенным промышленным растворителем, обладающим рядом важных свойств. Например, диоксан способен смешиваться с водой в любых мольных соотношениях. В силу этого исследование структуры водного раствора диоксана представляет большой научный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения. Метод молекулярной динамики позволяет исследовать характеристики раствора, недоступные экспериментальным техникам, а также способен проверить соответствие существующих силовых полей экспериментальным результатам.

В настоящей работе [1] проводится сравнительный анализ сетей водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана в силовых полях Смита [2] и OPLS-AA/CM1A [3] с моделью воды TIP4P. Рассчитывается общее число водородных связей на атом кислорода и удельное число водородных связей вода-вода и диоксан-вода, полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рентгеновскому рассеянию [4]. Вводится геометрический критерий перколяции сети водородных связей. Положения рассчитанных порогов перколяции сравниваются с экспериментом по широкополосной диэлектрической спектроскопии [5]. Расчеты проводятся в программном пакете LAMMPS, анализ молекулярно-динамических траекторий осуществляется с помощью программных пакетов TRAVIS и MDAnalysis.

Оба силовых поля хорошо описывают экспериментальные данные [4] по общему числу водородных связей на атом кислорода. Однако различия в сетях водородных связей между используемыми моделями наблюдаются только анализе удельных чисел водородных связей вода-вода и диоксан-вода. Заниженные значения числа связей вода-вода в модели OPLS-AA/CM1A согласуются с занижением энтальпии

растворения [6]. Оба силовых поля адекватно воспроизводят эксперимент [5] по нижнему порогу перколяции сети водородных связей. В отличие от OPLS-AA/CM1A, начало перколяции в модели Смита очень близко к экспериментальному верхнему порогу перколяции. При низких концентрациях диоксана в растворе присутствуют кластеры из 2–3 молекул диоксана, что согласуется с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей [4]. Силовое поле OPLS-AA/CM1A демонстрирует менее выраженную сеть молекул диоксана при мольных долях ≥ 0.20.

Автор выражает благодарность Н. Д. Кондратюку, И. В. Копаничуку и Г. Э. Норману за наставления и продуктивные научные дискуссии. Работа подготовлена в ходе исследований в рамках Программы академического лидерства «Приоритет 2030» в МФТИ (НИУ).

Литература

1. *Bakulin I. K.* [et al.]. Molecular-level insights to structure and hydrogen bonds network of 1, 4-dioxane aqueous solution // J. Mol. Liq. 2024. V. 393: 123523.
2. *Smith G. D.* [et al.]. A revised quantum chemistry-based potential for poly (ethylene oxide) and its oligomers in aqueous solution // J. Comput. Chem. 2002. V. 23(15). P. 1480–1488.
3. *Jensen K. P., Jorgensen W. L.* Halide, ammonium, and alkali metal ion parameters for modeling aqueous solutions // J. Chem. Theory Comput. 2006. V. 2(6). P. 1499–1509.
4. *Takamuku T.* [et al.]. Structure and dynamics of 1, 4-dioxane-water binary solutions studied by X-ray diffraction // J. Mol. Liq. 1999. V. 83(1–3). P. 163–77.
5. *Hernandez-Perni G.* [et al.]. Detection of percolation phenomena in binary polar liquids by broadband dielectric spectroscopy // Int. J. Pharm. 2005. V. 291(1–2). P. 197–209.
6. *Bakulin I.* [et al.]. Properties of aqueous 1, 4-dioxane solution via molecular dynamics // J. Chem. Phys. 2021. V. 155(15): 154501.

УДК 538.915

Тождества Уорда для магнитных фаз допированной двумерной модели Хаббарда: аналитические результаты и численные расчеты методом DMFT

И. А. Горемыкин, А. А. Катанин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Соединения с сильными межэлектронными корреляциями могут демонстрировать переходы между различными магнитными фазами в зависимости от температуры и допирования. Основной проблемой исследований этих соединений является тот факт, что из-за сильного межэлектронного взаимодействия стандартные подходы теории твердого тела теряют свою предсказательную силу для этих систем. Требуются более сложные методы учета межэлектродных корреляцией и тех эффектов, к которым они могут приводить.

Стандартным способом исследования магнитного порядка и магнитных флуктуаций является анализ обобщенной магнитной восприимчивости (в формализме мнимого времени)

$$\chi_q{}^{\alpha\beta}(i\omega_n) = \int_0^\beta < \hat{S}_{-q}{}^{\alpha}(\tau)|\hat{S}_{+q}{}^{\beta}(0) > e^{-i\omega_n\tau}d\tau. \quad (1)$$

В данной работе мы исследовали общую структуру обобщенной динамической магнитной восприимчивости $\chi^{\alpha\beta}{}_q(\omega)$, содержащей в себе всю полноту экспериментально доступной информации о магнитной структуре и магнитных флуктуациях, и проверили выполнение полученных соотношений для сильнокоррелированной системы на основе численных расчетов методом DMFT.

Для этого была рассмотрена однозонная двумерная модель Хаббарда в режиме сильных межэлектронных корреляций $U \sim W = 8t$, где U — величина экранированного локального кулоновского взаимодействия, а W — ширина соответствующей электронной зоны. Гамильтониан этой модели имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}(\hat{c}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma}) + U\sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2)$$

Он описывает взаимодействующие друг с другом электроны на двумерной квадратной решетке с законом дисперсии, в котором учтены перескоки между ближайшими и следующими после ближайших соседями с амплитудами перескока t и t' соответственно. Данная модель оказывается пригодной для описания некоторых свойств целого ряда соединений, среди которых находятся купраты и некоторые

проводники на основе высокомолекулярных кристаллов органических солей [2]. В обоих случаях общепринятым является существенное влияние магнитных флуктуаций на состояние системы. Для квадратной решетки купратов

$$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = -2t(cos(k_x) + cos(k_y)) + 4t' cos(k_x) cos(k_y). \quad (3)$$

Расчеты были выполнены при следующих значениях параметров модели Хаббарда: $t'/t = -0.15$, $U/t = 7.5$, $T = 0.1t$и различных уровней дырочного допирования x.

Рассматривая термодинамический потенциал W как функционал, зависящий от внешних калибровочных полей ${A_i}^{\mu;\alpha}(\tau)$, динамические восприимчивости могут быть записаны в виде вариационных производных:

$$\chi_{q,q'}{}^{\alpha\beta}(\tau) = \frac{\delta^2 W}{\delta {A_{-q}}^{0;\alpha}(\tau)\delta {A_{q'}}^{0;\beta}(0)}. \quad (4)$$

Спиновая корреляционная функция тесно связана с токовой корреляционной функцией

$$K_q{}^{\mu\nu;\alpha\beta}(i\omega_n) = \frac{\delta^2 W}{\delta {A_{-q}}^{\mu;\alpha}(\tau)\delta {A_{q'}}^{\nu;\beta}(0)} = \int_0^\beta < \hat{J}_{-q}{}^{\mu;\alpha}(\tau)|\hat{J}_{+q}{}^{\nu;\beta}(0) > e^{-i\omega_n\tau}d\tau. \quad (5)$$

Здесь$\hat{S}_{+q}{}^{\beta}(\tau)$ — β-я компонента оператора спиновой плотности на волновом векторе q в представлении взаимодействия, $\hat{J}_q{}^{\mu;\alpha}(\tau)$ — оператор спин-поляризованного в направлении $\alpha = x, y, z$ электрического тока, текущего в направлении $\mu = x, y$ на волновом векторе q в представлении взаимодействия.

Калибровочная инвариантность термодинамического потенциала W (в данном случае она связана с возможностью локальных преобразований системы координат) накладывает ограничения на форму зависимости термодинамического потенциала W от введенных выше полей ${A_i}^{\mu;\alpha}(\tau)$. Эти ограничения приводят к определенным тождествам, которым обязаны удовлетворять функции отклика (1,5).

В коллинеарном антиферромагнитном (АФМ) случае тождества приводят к следующей аналитической структуре матрицы магнитной восприимчивости в базисе ($S^x_{q=0}, S^y_{q=0}; S^x_{q=Q}, S^y_{q=Q}$):

$$\chi^{AFM}_{q,q'}(i\omega_n) = d_{\omega_n}\begin{pmatrix} h\chi_{\omega_n} & 0 & 0 & \omega_n\chi_{\omega_n} \\ 0 & h\chi_{\omega_n} & -\omega_n\chi_{\omega_n} & 0 \\ 0 & \omega_n\chi_{\omega_n} & m & 0 \\ -\omega_n\chi_{\omega_n} & 0 & 0 & m \end{pmatrix} \quad (6)$$

где $d_{\omega_n} = \frac{m}{hm+\omega_n^2\chi_{\omega_n}}$, h — величина внешнего поля, сонаправленного с параметром порядка АФМ фазы m, а χ_{ω_n}— временная компонента спиновой жесткости. Для неоднородных восприимчивостей в работе найдено выражение

$$\chi^{xx,yy}_{q\pm Q,q\pm Q} = \frac{m^2}{hm+\chi_{\omega_n}\omega_n^2+\rho q^2} \quad (7)$$

Для выполнения численных расчетов нами был использован примесный солвер на основе алгоритма квантового Монте-Карло CT-QMC, реализованный в пакете iQIST [3]. Процедура расчета нелокальных величин описана в предыдущей статье авторов данной работы [4] и реализована в виде отдельного расчетного кода на языке Fortran, позволяющего производить как MF, так и DMFT расчеты. Итоговый расчет корреляторов (1,5) по неприводимым по межэлектронному взаимодействию U диаграммам был реализован в виде модуля на языке Python. В виде надстройки над этим модулем были реализованы анализ результатов расчетов и их визуализация.

На рис. 1 представлены соответствующие результаты для магнитной восприимчивости в рамках теории среднего поля для половинного заполнения.

В случае спирального магнитного порядка полученные тождества становятся более громоздкими, однако главным остается факт наличия голдстоуновских мод, имеющих вид

$$\chi^{xx,zz}_{q\pm Q,q\pm Q} = \frac{m^2}{hm+\chi_{2,\omega_n}\omega_n^2+\rho_{2,x}q_x^2+\rho_{2,y}q_y^2} \quad (8)$$

$$\chi^{yy}_{q\pm Q,q\pm Q} = \frac{m^2}{hm+\chi_{1,\omega_n}\omega_n^2+\rho_{1,x}q_x^2+\rho_{1,y}q_y^2} \quad (9)$$

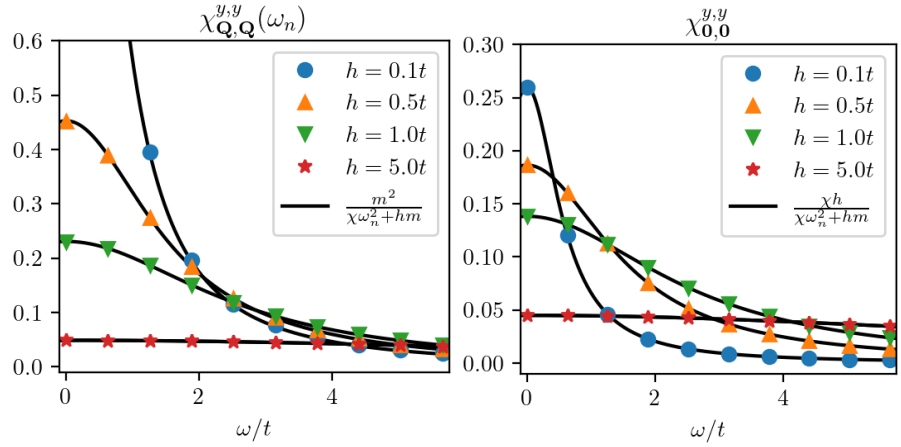


Рис. 4. Компоненты магнитной восприимчивости, рассчитанные в рамках теории среднего поля при половинном заполнении в АФМ состоянии в зависимости от магнитного поля h

На рис. 2 представлено сравнение численного расчета некоторых компонент магнитной восприимчивости с аналитическими формами зависимости для случая несоизмеримого магнитного порядка.

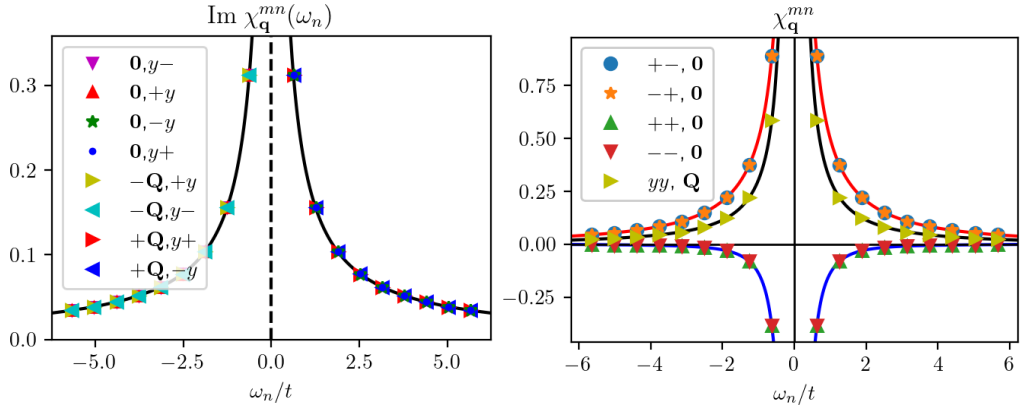


Рис. 2. Компоненты магнитной восприимчивости, рассчитанные в рамках DMFT при конечном допировании дырочной примесью для несоизмеримой магнитной фазы

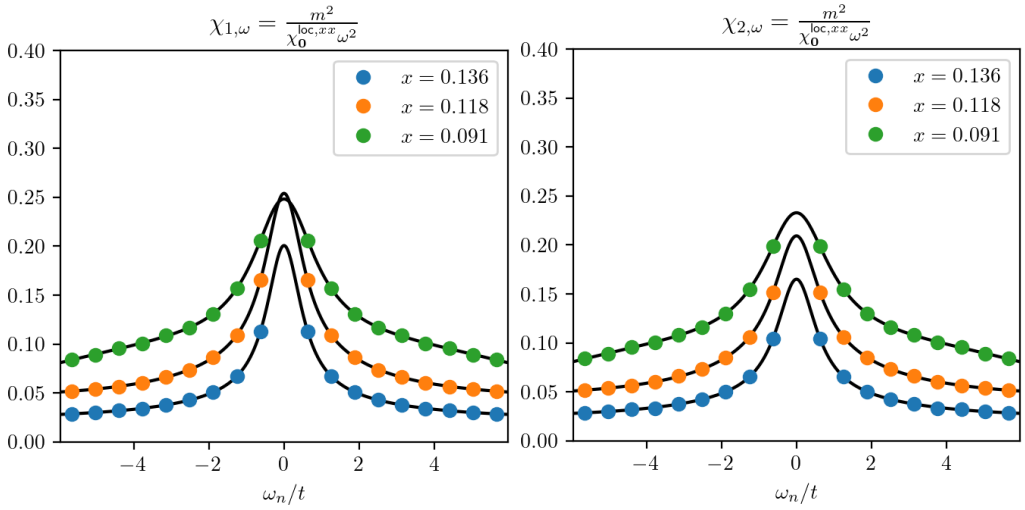


Рис. 3. Зависимости динамической спиновой жесткости от частоты при некоторых уровня допировании дырочной примесью в несоизмеримой магнитной фазе

Существенным результатом данной работы является то, что временные компоненты спиновых жесткостей $\chi_{\omega_n}, \chi_{1,\omega_n}, \chi_{2,\omega_n}$ в общем случае оказываются зависящими от частоты ω_n. Эта зависимость практически полностью исчезает вблизи половинного заполнения, в этом же случае жесткости, получаемые из MF и DMFT расчетов практически совпадают. На рис. 3 представлена зависимость полученных

жесткостей от уровня дырочного допирования x для несоизмеримого состояния системы, когда динамическими эффектами нельзя пренебрегать.

Пространственные компоненты жесткости ρ, ρ_1, ρ_2, определяющие дисперсию голдстоуновских мод в длинноволновом приближении, были определены на основе известных токовых корреляторов (5), что является еще одним следствием полученных тождеств Уорда. Таким образом, в рамках данной работ нами были получены тождества Уорда, определяющие структуру и взаимосвязь токового и спинового корреляторов для однозонной модели Хаббарда. Нами также была выполнена численная проверка полученных тождеств в рамках теории среднего поля и DMFT, определены соответствующие пространственные и временные жесткости.

Работа выполнена при поддержке фонда Базис (грант 21-1-1-9-1) и гос. задания 075-15-2021-606 Министерства науки и высшего образования РФ.

Литература

1. *Georges A.* [et al.]. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys. 1996 V. 68(1). P. 13–125.
2. *Kanoda K., Kato R.* Mott physics in organic conductors with triangular lattices // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2011 V. 2. P. 167–188.
3. *Huang L.* [et al.]. iQIST: An open source continuous-time quantum Monte Carlo impurity solver toolkit // Comput. Phys. Commun. 2015 V. 195. P. 140–160.
4. *Goremykin I. A., Katanin A. A.* Commensurate and spiral magnetic order in the doped two-dimensional Hubbard model: Dynamical mean-field theory analysis // Phys. Rev. B 2023 V. 107(24): 245104.

УДК 539.194

Исследование структуры и свойств молекулы ThF^+ релятивистским методом связанных кластеров

***И. Г. Кожевников*[1], *А. В. Олейниченко*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]НИЦ Курчатовский институт“ — ПИЯФ

В настоящий момент одним из важных направлений современной физики является измерение электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона. Электрический дипольный момент является фундаментальным свойством частицы. Измерение ЭДМ электрона может привести к обнаружению нарушения временной инвариантности в физике. Отклонение от предсказаний Стандартной модели физики при измерении ЭДМ электрона может указывать на существование новых физических явлений или взаимодействий, выходящих за рамки существующих теорий. Отличным кандидатом для измерения ЭДМ является молекула монофторида тория (ThF^+), так как чувствительное к ЭДМ состояние $^3\Delta_1$ является основным электронным состоянием и, следовательно, устойчиво к декогеренции от спонтанного распада. Проведение подобных экспериментов требует подробной информации о низколежащих электронных состояниях молекулы, но сведений об этой молекуле достаточно мало, что добавляет актуальности исследованию [1].

Целью данной работы является проведение прецезионного релятивистского квантовохимического моделирования структуры и излучательных свойств молекулы ThF^+ в различных низколежащих электронных состояниях. В рамках работы был проведен расчет потенциальных кривых для нескольких электронных состояний методом FS RCCSD (релятивистский метод связанных кластеров с одно- двукратными возбуждениями в пространстве Фока) и был проведен расчет спектроскопических постоянных. Исследование электронной структуры соединений, содержащих тяжелые элементы, требует учета принципов специальной теории относительности (СТО) для описания релятивистских эффектов. Эти эффекты проявляются из-за сильных полей и высоких скоростей электронов вблизи ядер с большим зарядом [2]. Молекулярные спиноры были получены релятивистким методом Хартри-Фока в приближении псевдопотенциала в программном пакете DIRAC [3]. Для дальнейшего уточнения был использован CCSD в программном пакете EXP-T [4]. Результаты расчета потенциальных кривых для первых четырех низколежащих электронных состояний молекулы ThF^+ приведены на рис. 1.

Проведен расчет спектроскопических постоянных (ω_e, r_e) для низколежащих электронных состояний и их сравнение с экспериментом [5] (табл. 1). Отклонение спектроскопических постоянных от

экспериментального значения может быть обусловлено необходимостью учитывать трехкратные возбуждения в кластерном операторе и эффекты валентно-остовной корреляции для атома тория.

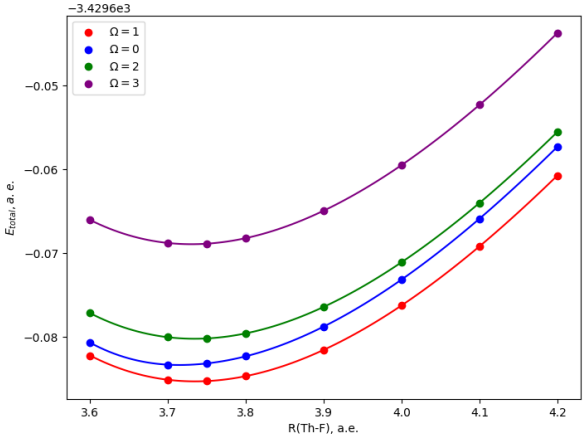


Рис. 1. Потенциальные кривые низколежащих электронных состояний молекулы ThF^+

Т а б л и ц а .1 Расчет спектроскопических постоянных методом FS RCCSD

	FS RCCSD		Эксперимент	
	ωe, $см^{-1}$	r_e ,a.e.	ωe, $см^{-1}$	r_e ,a.e.
$\|\Omega\| = 1$	710.67	3.733	651.1	3.763
$\Omega = 0^+$	817.89	3.716	659.8	3.739
$\|\Omega\| = 2$	714.01	3.732	651.9	3.763
$\|\Omega\| = 3$	729.03	3.728	652.7	3.761

Литература

1. *Boon K.* [et al.] Spectroscopy on the eEDM-sensitive states of ThF^+ // Phys. Rev. A. 2022. V. 105: 022823.
2. *Зайцевский А. В.* Релятивистская теория электронного строения молекул: методическая разработка. — М.: МГУ, 2005.
3. *Saue T.* [et al.] The DIRAC code for relativistic molecular calculations // J. Chem. Phys. 2020. V. 152: 204104.
4. *Oleynichenko A. V., Zaitsevskii A., Eliav E.* Towards High Performance Relativistic Electronic Structure Modelling: The EXP-T Program Package // Commun. Comp. Inf. Sci. 2020. V. 1331. P. 375–386.
5. *Barker B. J.* [et al.]. Spectroscopic investigations of ThF and ThF^+ // Chem. Phys. 2012. V. 136: 104305.

УДК 544.25

Фазовый переход в жидком кристалле 5CB

***Н. А. Касапенко*[1,2], *Н. Д. Кондратюк*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Для численного моделирования диффузии фоточувствительной молекулы мотора в нематическом жидком кристалле по мотивам экспериментальной работы [1], была поставлена задача получения нематической фазы на примере молекулы 5CB (4-пентил-4’-цианобифенил). Исследование транспортных свойств жидких кристаллов и молекул-моторов, в них помещенных, представляет интерес для управления молекулярными машинами. Авторами [2, 3] был создан собственный потенциал QMD/FF, дающий отличное согласование с экспериментом таких параметров жидкого кристалла 5CB как плотность, параметр порядка, коэффициент температурного расширения, энергия активации и др. При этом был рассмотрен диапазон температур от 17 до 57°C. Однако предложенный авторами метод вычислительно сложный для расширения на другие молекулы nCB.

В методе молекулярной динамики была создана вычислительная ячейка, состоящая из 1100 молекул жидкокристаллического соединения 5CB, находящегося в изотропной фазе при температуре 300 K. В NPT-ансамбле в течение 1.8 мкс рассчитывалась динамика системы с использованием потенциала GAFF.

Для определения фазы жидкого кристалла параметр ориентационного порядка системы вычислялся как собственное значение, соответствующее максимальному собственному вектору ориентационной матрицы:

$$Q_{ab} = < \frac{1}{2}(3u_a u_b - \delta_{ab}) > \quad (1)$$

где вектор $\vec{u}(u_x, u_y, u_z)$ задает направление главной оси молекулы, а индексы a, b принимают значения декартовых осей x, y и z. При этом усреднение ведется по всем молекулам.

В ходе моделирования была получена нематическая фаза с параметром порядка 0.51, что хорошо согласуется с экспериментальными значениями 0.53–0.58 [4,5]. Наблюдаются небольшие флуктуации параметра порядка около значения 0.51 в течение 0.8 мкс.

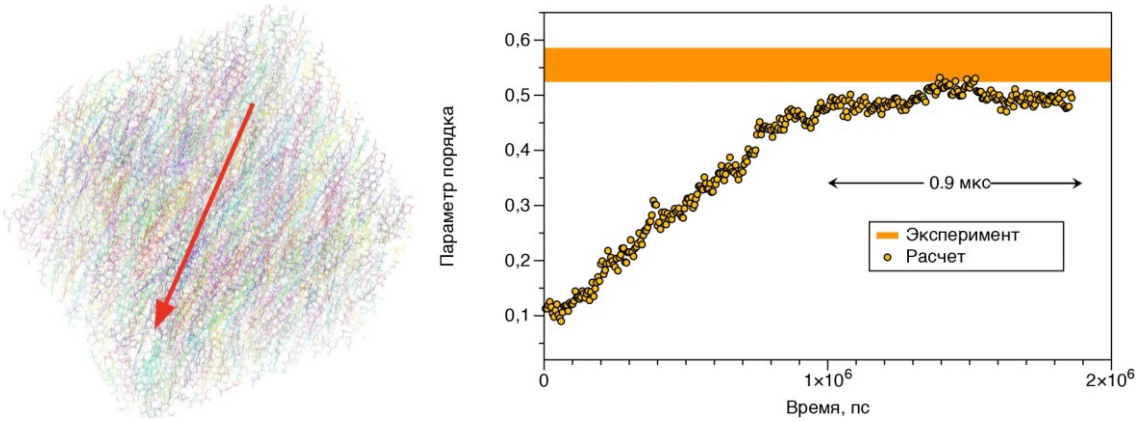


Рис. 1. *Слева* — вычислительная ячейка. Красным вектором указано направление директора. *Справа* — график зависимости параметра порядка системы от времени. Оранжевой линией обозначен диапазон экспериментальных данных [4, 5]

Для наблюдаемого перехода из изотропной фазы в нематическую были построены характерные зависимости энергии системы, ее размеров и плотности от времени. Для полученной нематической фазы в NVT-ансамбле рассчитаны коэффициенты диффузии $D_{||}$, $D_{\perp}$ вдоль директора и в направлении, перпендикулярном ему.

Литература

1. *Orlova T.* [et al.]. Revolving supramolecular chiral structures powered by light in nanomotor-doped liquid crystals // Nat. Nanotechnol. 2018. V. 13(4) P. 304–308.
2. *Vilhena J. G.* [et al.]. Automated parametrization of quantum mechanically derieved force fields for soft materials and complex fluids: development and validation // J. Chem. Theory Comput. 2021. V.17(7) P. 4449–4464.
3. *Prampolini G.* [et al.]. Predicting Spontaneous Orientational Self-Assembly: In Silico Design of Materials with Quantum Mechanically Derived Force Fields // J. Phys. Chem. Lett. 2021. V. 13(1) P. 243–250.
4. *Roushdy M.* Optical behavior and related properties of the binary mixture 5CB/8CB liquid crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2006. V. 457. P. 151–160.
5. *Magnuson M. L.* [et al.]. On the temperature dependence of the order parameter of liquid crystals over a wide nematic range // Liq. cryst. 1995. V. 19. P. 823–832.

УДК 538.913

Рамановский спектр GeS_2 из первых принципов

***К. В. Кравцов*[1], *И. А. Завидовский*[1], *И. А. Круглов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова

В последние два десятилетия существенно возрос интерес к использованию слоистых материалов в различных сферах науки и технологий: начиная от очистки воды от примесей и альтернативных электродов для литий-ионных батарей, заканчивая устройствами для нанофотоники следующего поколения [1, 2]. Так, данный класс материалов обладает выдающимися оптическими свойствами благодаря их

гигантской оптической анизотропии [2]. Это делает их идеальными кандидатами для использования в волноводах нанометровых размеров, но для этого важна высокая анизотропия в плоскости. Таким свойством обладает GeS_2. Поэтому исследование кристаллической структуры и связанных с ней свойств GeS_2 является крайне интересной и важной задачей.

Рамановская спектроскопия — это один из самых надежных методов установления кристаллической структуры твердых тел, а также молекулярных соединений. Он нацелен на детектирование уровня загрязнения образцов, а также внутренних напряжений и деформаций. Так, например, для двух образцов гексаборида самария разной чистоты (99,9999% и 99,9%) было показано превосходство метода КРС над рентгеновской дифракцией для установления микроструктурных изменений, вызванных азотными примесями [3].

В данной работе с помощью первопринципных методов был рассчитан рамановский спектр сульфида германия (IV) ($P2_1/c$). Для этого использовался доработанный авторами данной работы исходный код пакета phonopy-spectroscopy [4]. Для расчета использовались установленные с помощью метода рентгеновской дифракции параметры кристаллической структуры. Фононная зонная структура вычислялась в рамках гармонического приближения, а раман-тензор — в рамках метода возмущения функционала электронной плотности (DFPT).

Рассчитанный рамановский спектр GeS_2 (рис. 1) оказался в прекрасном соответствии с экспериментальными данными из работы [5] и нашими экспериментальными измерениями. Также в работе обсуждаются причины смещений пиков и методы улучшения их позиций.

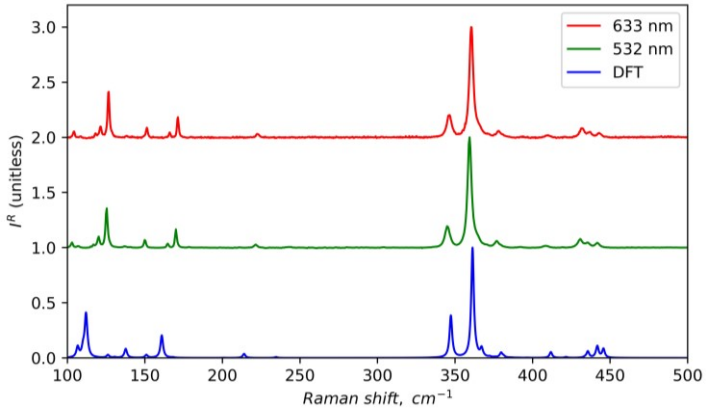


Рис. 1. Рамановские спектры GeS_2: экспериментальные, снятые на лазерах в 633 нм (красный) и 532 нм (зеленый); расчетный (синий)

Литература

1. *Maio A.* [et al.]. An overview of functionalized graphene nanomaterials for advanced applications // Nanomaterials. 2021. V. 11(7). P. 1717–1747.
2. *Ermolaev G. A.* [et al.]. Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // Nat. Commun. 2021. V. 12(1). P. 854–861.
3. *Nguyen T. H.* [et al.]. Raman spectroscopic evidence of impurity-induced structural distortion in SmB_6 // J. Raman Spectrosc. 2019. V. 50(11). P. 1661–1671.
4. *Skelton J. M.* [et al.]. Lattice dynamics of the tin sulphides SnS_2, SnS and Sn_2S_3: vibrational spectra and thermal transport // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. V. 19(19). P. 12452–12465.
5. *Inoue K., Matsuda O.*, *Murase K.* Raman spectra of tetrahedral vibrations in crystalline germanium dichalcogenides, GeS_2 and $GeSe_2$, in high and low temperature forms // Solid State Commun. 1991. V. 79(11). P. 905–910.

УДК 539

Моделирование краевых дислокаций методом молекулярной динамики: сравнение гцк алюминия и мононитрида урана

Л. С. Пилюгин, В. В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Дислокации являются одним из типов протяженных дефектов в кристалле. Их наличие заметно влияет на механические свойства кристалла. Так, способность кристалла к пластической деформации

обусловлена наличием в кристаллической решетке дислокаций [1]. Поэтому исследование дислокаций и их поведения при воздействии на кристалл важно для предсказания свойств материалов.

Дислокации и их поведение хорошо изучены в чистых металлах. Для более сложных веществ было проведено не так много исследований. Одним из таких веществ является мононитрид урана — перспективное топливо для ядерных реакторов.

Экспериментальные методы исследования дислокаций на атомарном уровне очень сложны [2]. Поэтому для понимания механизмов их поведения применяется метод молекулярной динамики.

В работе изучается поведение дислокаций в мононитриде урана и алюминии на атомарном уровне при помощи метода молекулярной динамики. Для расчетов используется пакет LAMMPS и несколько моделей потенциалов межатомного взаимодействия: eam, adp и snap. Также проводится сравнение типов дислокаций и их особенностей в этих веществах.

Литература

1. *Куксин А. Ю., Стегайлов В. В., Янилкин А. В.* Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии // Доклады академии наук. 2008. Т. 420. № 4. С. 467–471.
2. *Li N.* [et al.]. Quantification of dislocation nucleation stress in TiN through high-resolution in situ indentation experiments and first principles calculations // Sci. Reports. 2015. V. 5: 15813.

УДК 538.951

Упругие свойства, пиролиз и диффузия газа в керогенах по данным атомистического моделирования

***М. С. Алексеева*[1,2], *М. А. Логунов*[1,2], *А. А. Ананьев*[1], *А. Н. Хлюпин*[1], *Н. Д. Кондратюк*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Кероген — это смесь органических веществ, преимущественно остатков растений и животных, которые в процессе диагенеза и катагенеза подверглись изменениям и уплотнению. Состав керогена меняется в зависимости от возраста и истории T/P исходной породы, при этом керогены становятся более богатыми углеродом с увеличением T, P и времени. Изучение керогенов [1–5] актуально в свете истощения традиционных углеводородных источников и необходимости поиска новых. В данной работе проводится атомистическое моделирование керогенов на основе конфигураций, полученных путем случайной упаковки молекул в расчетную ячейку (рис. 1). Расчеты выполняются для структур с разной упаковкой для выявления общего тренда зависимостей. Исследуется зависимость поведения структуры от скорости сжатия матрицы керогена. Проводится сравнения результатов, полученных с помощью моделирования в программном пакете GROMACS и LAMMPS с использованием REAX-FF.

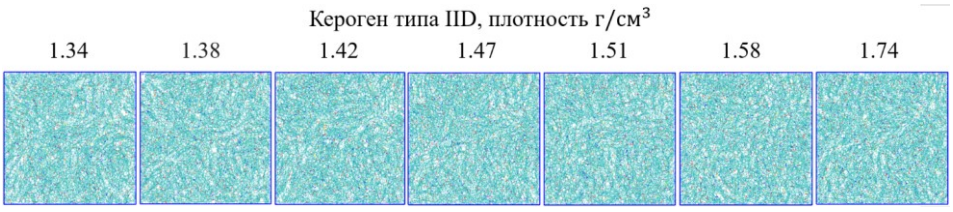


Рис. 1. Различные конфигурации керогена типа IID, для которых проводятся расчеты в данной работе

Исследуются упругие свойства незрелых (IA) и перегретых (IID) керогенов, в частности, объемный модуль упругости и модуль Юнга, а также их зависимость от присутствующего метана в матрице (рис. 2). Рассматривается взаимосвязь этих параметров с пористостью структуры. В работе определяются продукты пиролиза с помощью молекулярно-динамических расчетов по нагреву керогенов с потенциалом ReaxFF. Результаты сравниваются с экспериментальными данными по продуктам выхода совместно с экспериментальной группой из King Fahd University of Petroleum and Minerals. Проводится анализ траекторий отдельных молекул газа (H_2, CH_4) в матрице керогена на основе длинных расчетов до 5 мкс.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021).

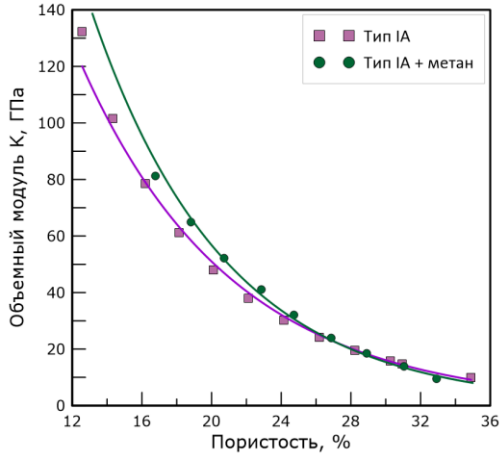


Рис. 2. Зависимость объемного модуля упругости керогена типа IA от наличия метана в матрице

Литература

1. *Yu K. B.* [et al.]. Supercritical carbon dioxide enhanced natural gas recovery from kerogen micropores // Journal of CO2 Utilization. 2022. V. 62: 102105.
2. *Kashinath A.* [et al.]. Modeling the Effect of Maturity on the Elastic Moduli of Kerogen Using Atomistic Simulations // Unconventional Resources Technology Conference (URTeC). 2019. P. 391–406.
3. *Qian Y.* [et al.]. Primary understanding of non-isothermal pyrolysis behavior for oil shale kerogen using reactive molecular dynamics simulation // International Journal of Hydrogen Energy. 2016. V. 41(28). P. 12093–12100.
4. *Lee H.* [et al.]. Adsorption based realistic molecular model of amorphous kerogen // RSC advances. 2020. V. 10(39). P. 23312–23320.
5. *Yu K. B.* [et al.]. Diffusion behavior of methane in 3D kerogen models // Energy & Fuels. 2021. V. 35(20). P. 16515–16526.

УДК 538.9

Поляронный транспорт в феррите никеля $NiFe_2O_4$

***Н. А. Фоминых*[1,2], *В. В. Стегайлов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Шпинели оксидов переходных металлов представляют собой важный класс материалов. Их свойства могут играть большую роль в различных практических приложениях, например, таких как процесс коррозии, электрокатализ или микроэлектроника. Кроме того, эти системы представляют фундаментальный интерес из-за эффектов, связанных с сильными электронными корреляциями.

Феррит никеля $NiFe_2O_4$ является перспективным материалом в устройствах спинтроники и энергонезависимой резистивной памяти. Механизм поляронной проводимости, обычно наблюдаемый в оксидах переходных металлов, может иметь решающее значение для понимания фундаментальных основ свойств транспорта зарядов. Существует множество различных экспериментальных исследований феррита никеля, которые показывают большую сложность механизма переноса заряда с возможностью существования как электронных, так и дырочных поляронных носителей. Основываясь на успешных попытках описания магнетита [1] и хромита [2], мы построили модель феррита-шпинели никеля в рамках метода DFT+U. В данной работе будут представлены результаты по взаимосвязи катионного упорядочения в октаэдрической подрешетки и соответствующего орбитального упорядочения, рассмотрена зонная структура и ширина запрещенной зоны, а также получены энергии активации поляронного хоппинга.

Литература

1. *Shutikova M. I., Stegailov V. V.* Frenkel pair formation energy for cubic Fe3O4 in DFT+U calculations // Journal of Physics: Condensed Matter. 2022. V. 34: 475701.
2. *Fominykh N. A., Stegailov V. V.* Polarons and Charge Transfer in FeCr2O4 Chromite Treated by the DFT+U Method // JETP Letters. 2023. V. 117. P. 849–853.

УДК 538.931

Верификация межатомных потенциалов по вязкости и растворимости для моделирования жидких мембран

***О. В. Кашурин*[1,2], *Н. Д. Кондратюк*[1,2,3], *А. В. Ланкин*[1,2], *Г. Э. Норман*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН
[3] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

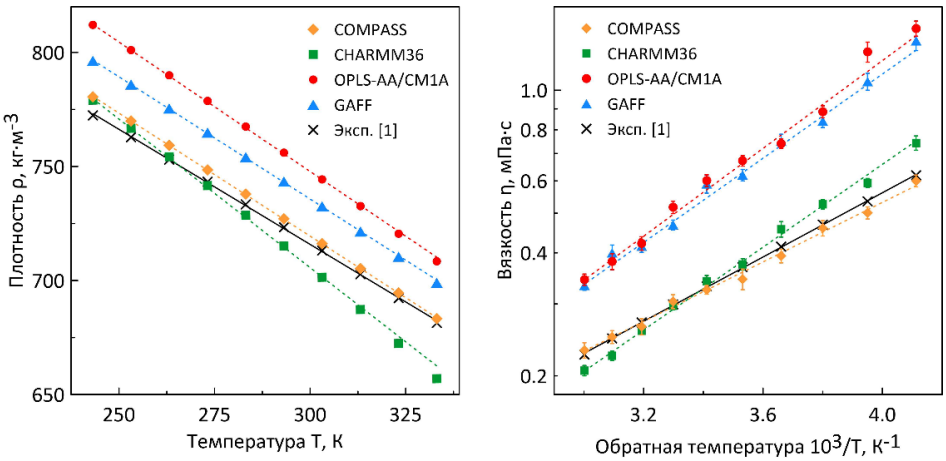
Простые эфиры, краун-эфиры и криптанды — одни из наиболее перспективных компонент жидких ион-селективных барьеров. Такие барьеры представляют из себя жидкую мембрану, где слой эфира разделяется двумя слоями водного раствора. Селективная проницаемость такого слоя по отношению к разным ионам может использоваться как для выделения из водных растворов редких элементов, таких как литий или рубидий, так и при создании новых перспективных электрохимических источников тока типа проточных redox элементов.

Исследование свойств таких систем удобно проводить с помощью методов молекулярной динамики (МД). Однако при этом необходимо убедиться, что используемый при моделировании межатомный потенциал воспроизводит важные для рассматриваемых физических процессов свойства системы. Для ион-селективного барьера типа жидкой мембраны важными являются транспортные свойства, такие как вязкость и диффузия, а также термодинамические свойства — растворимость и коэффициенты распределения.

Для проверки точности описания физических свойств системы тем или иным межатомным потенциалом необходимо проводить сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. Экспериментальные данные по краун-эфирам и простым эфирам достаточно скудны. Однако среди них выделяется диизопропиловый эфир (DIPE) — простой алифатический эфир. Он обладает хорошей селективностью по отношению к редкоземельным металлам. При этом для DIPE в литературе имеется достаточно широкий набор экспериментальных данных, в частности по вязкости, а также растворимости и коэффициентам распределения этанола в системе DIPE + Этанол + Вода.

Исследования, посвященные МД моделированию диизопропилового эфира и его смесей с другими веществами, не проводились. Есть работы по моделированию методом МД других простых эфиров, однако по результатам данных работ нельзя сделать однозначный выбор потенциала, который бы подходил для моделирования селективных жидких барьеров.

В данной работе мы проводим сравнение распространенных межатомных потенциалов GAFF, OPLS-AA/CM1A, CHARMM36 и COMPASS с целью найти наилучший потенциал для качественного моделирования жидких ион-селективных барьеров на основе простых эфиров. В качестве основного вещества для моделирования используется DIPE. С использованием выбранных потенциалов проводятся расчеты плотности и вязкости DIPE. Также, с использованием CHARMM36 и COMPASS мы проводим оценку взаимной растворимости воды и DIPE, а также коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE.



а *б*

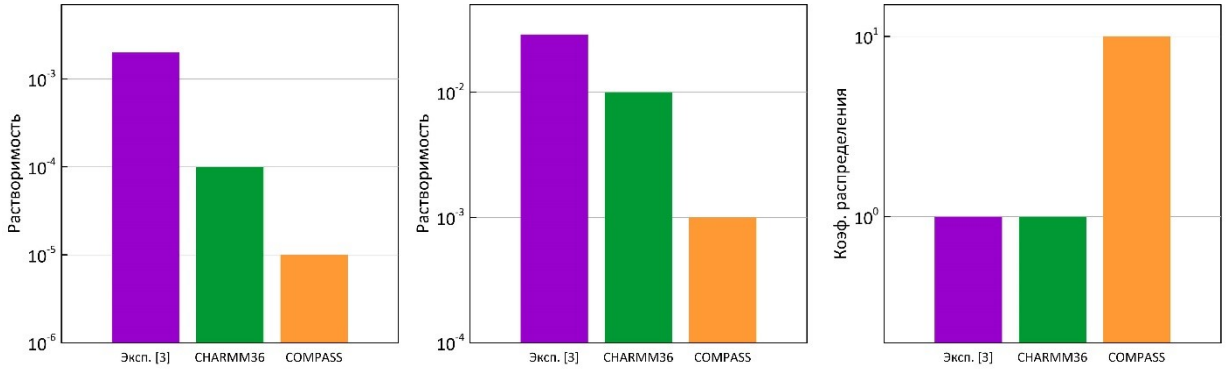
Рис. 1. Температурные зависимости плотности (*а*) и вязкости (*б*) диизопропилового эфира, рассчитанные с использованием различных потенциалов

Вязкость рассчитывалась методом Грина-Кубо. Расчеты плотности и коэффициентов вязкости DIPE проведены в диапазоне температур 243–333 K и давлении 0.1 МПа. Результаты приведены на рис. 1.

Все 4 потенциала хорошо воспроизводят плотность, отклоняясь от эксперимента не более чем на 4–5 %. Однако GAFF и OPLS-AA/CM1A дают сильное отклонение для вязкости. Это означает, что GAFF и OPLS-AA не подходят для моделирования жидких мембран на основе простых эфиров. CHARMM36 и COMPASS обеспечивают хорошую сходимость значений вязкости с экспериментом, давая отклонение не больше 10 % при 273–333 K. Предварительные результаты по плотности и вязкости опубликованы в [2].

С использованием CHARMM36 и COMPASS произведена оценка взаимной растворимости воды и DIPE, а также коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE. Растворимость и коэффициенты распределения оценивались с помощью следующего метода: в ячейке создаются ориентированные вдоль оси *Oz* фазы с преобладанием воды и фазы с преобладанием диизопропилового эфира. По установившейся зависимости плотности диизопропилового эфира, воды и этанола от координаты z определяется молярный состав каждой из фаз, зная который можно оценить растворимость или коэффициенты распределения. Важно отметить, что данный метод не позволяет получать точные результаты, но подходит для грубой оценки по порядку величины.

Результаты оценки термодинамических свойств приведены на рис. 2. CHARMM36 занижает на порядок растворимость диизопропила в воде и попадает в тот же порядок по растворимости воды в диизопропиле и коэффициентам распределения этанола. COMPASS занижает растворимость диизопропила в воде на два порядка и растворимость воды в диизопропиле на один порядок, а также ошибается на один порядок в коэффициентах распределения.



а *б* *в*

Рис. 2. Оценка растворимости DIPE в воде (*а*), растворимости воды в DIPE (*б*), коэффициентов распределения этанола в растворе воды и DIPE (*в*)

По совокупности свойств потенциалы CHARMM36 и COMPASS могут быть использованы для качественного предсказания свойств жидких мембран на основе простых эфиров. Однако при сравнении CHARMM36 и COMPASS можно заключить, что CHARMM36 воспроизводит термодинамические свойства раствора диизопропила с водой лучше, чем COMPASS, а небольшое преимущество по точности воспроизведения транспортных свойств потенциалом COMPASS при качественном описании не играет значительной роли. В связи с этим CHARMM36 можно назвать наилучшим среди рассмотренных потенциалом для качественного моделирования ион-селективных барьеров на основе простых эфиров.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021). Автор благодарит Н. Кондратюка за помощь в выборе потенциалов, А. Ланкина и Г. Нормана за постановку задачи и анализ результатов.

Литература

1. *Meng X.* [et. al]. Viscosity and Density Measurements of Diisopropyl Ether and Dibutyl Ether at Different Temperatures and Pressures // J. Chem. Eng. 2009. V. 54. P. 2353–2358.
2. *Kashurin O.* [et. al]. Molecular Dynamics Simulation of Diisopropyl Ether Using Various Interatomic Potentials // Russ. J. Phys. Chem. A. 2023. V. 97(6). P. 1183–1189
3. *Arce A.* [et. al]. Liquid−Liquid Equilibrium of Diisopropyl Ether + Ethanol + Water System at Different Temperatures // J. Chem. Eng. 2002. V. 47. P. 529–532.

УДК 532.61.092

Адсорбция и поверхностное натяжение на границе жидкостей в системе вода-толуол-н-додекан

***О. М. Смирнов*[1], *В. В. Писарев*[1,2,3]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Центральное место нефтепромысловых процессов отводится изучению поверхностных явлений, которые играют ключевую роль в оценке и эксплуатации нефтяных месторождений. К двум наиболее значимым явлениям относятся адсорбция и поверхностное натяжение. И отслеживание этих свойств имеет первостепенное значение, поскольку от них зависит эффективность применения современных методов добычи углеводородов. При этом вода играет ключевую роль во многих из этих методов, включая гидравлический разрыв и заводнение пластов, поэтому исследования, посвященные системам «вода-углеводороды» особенно актуальны.

И в рамках работы были определены зависимости коэффициента адсорбции и поверхностного натяжения от давления. Адсорбентом выступила вода, а толуол — адсорбантом, при этом толуол был смешан с водой и н-додеканом.

Моделирование производилось методом молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS [1]. Для описания межатомного взаимодействия додекана и толуола использовались SAFT-gamma Mie модели, предложенные в работах [2] и [3] соответственно, а для воды — модель CGW2-ift, предложенная в работе [4]. Данные представления упрощают структуру молекул, объединяя соседствующие атомы в псевдоатомы и тем самым значительно увеличивая скорость расчетов.

Поверхностное натяжение рассчитывалось через усредненные значения диагональных компонент тензора напряжений (P_{ii}):

$$\sigma = \frac{L_x}{2}\left(P_{xx} - \frac{(P_{yy}+P_{zz})}{2}\right), \quad (1)$$

где L_x — длина моделируемой ячейки вдоль оси x. Полученные таким образом величины коэффициента поверхностного натяжения представлены на рис. 1.

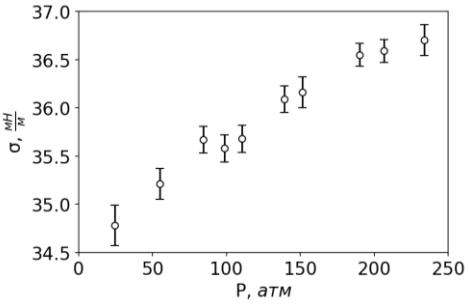


Рис. 1. График зависимости коэффициента поверхностного натяжения системы вода-толуол-н-додекан от давления

Гиббсовская адсорбция же определялась как количество избыточных атомов на единицу поверхности межфазной границы. Избыточное количество компонента можно определить через разность количества вещества компонента, фактически присутствующего в расчете, и гипотетического количества вещества:

$$\Gamma^i = N^i - \left[(x_{s2} - x_{s1})\rho^1 + \left(L_x - (x_{s2} - x_{s1})\right)\rho^2\right] \cdot S, \quad (2)$$

где L_x — длина моделируемой ячейки вдоль оси x, S — поперечное ей сечение, x_{s1} и x_{s1} — положения поверхностей Гиббса, а ρ^1 и ρ^2 — плотности вещества в фазах 1 (вода) и 2 (вода—толуол—н-додекан).

Для определения x_{s1} и x_{s1} использовались два метода расчета. В первом усредненный профиль плотности толуола аппроксимировался суммой гиперболических тангенсов, каждый из которых соответствует одной из межфазных поверхностей. Формула использовалась следующая:

$$\rho(x) = \rho^1 + \frac{\rho^2 - \rho^1}{2}\left[tanh\left(\frac{x - x_{s1}}{D}\right) - tanh\left(\frac{x - x_{s2}}{D}\right)\right], \quad (3)$$

где D — характерная толщина межфазной поверхности. Результаты представлены на рис. 2*а*.

Второй же метод заключается в определении такого значения $(x_{s2} - x_{s1})$, чтобы коэффициент адсорбции воды по формуле (2) был равен нулю. После чего для этой же величины определяется коэффициент адсорбции толуола. Получившаяся зависимость представлена на рис. 2*б*.

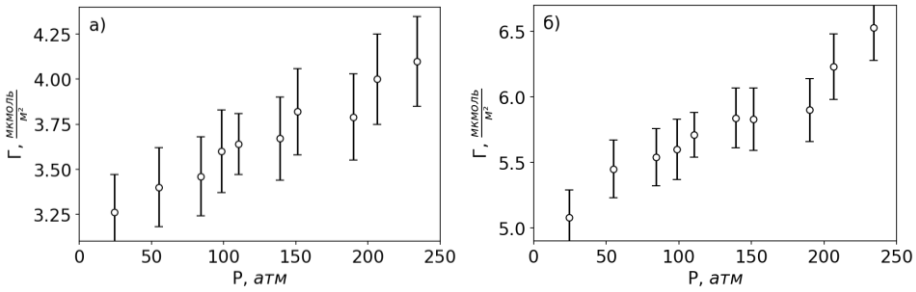


Рис. 2. Графики зависимости адсорбции толуола от давления, определенные по профилю толуола (*а*) и профилю воды (*б*)

Литература

1. *Thompson A. P.* [et al.]. LAMMPS — a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Comput. Phys. Commun. 2022. V. 271: 108171.
2. *Rahman S. U.* [et al.]. Saft-γ force field for the simulation of molecular fluids. 5. Hetero-group coarse-grained models of linear alkanes and the importance of intramolecular interactions // J. Phys. Chem. B. 2018. V. 122(39). P. 9161–9177.
3. *Herdes C.* [et al.]. Prediction of the water/oil interfacial tension from molecular simulations using the coarse-grained SAFT-γ Mie force field Fluid Phase Equilib. 2018. V. 476. P. 9–15.
4. *Lobanova O. R.* Development of coarse-grained force fields from a molecular based equation of state for thermodynamic and structural properties of complex fluids: Thes. … Doct. Philosoph. London, 2014.

УДК 620.193.01, 620.193.4

Описание процесса растворения хромистой шпинели в контакте с жидким расплавом свинца-висмута с помощью локально равновесного термодинамического подхода

***П. А. Дусман*[1], *Д. А. Колотинский*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университете)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Одной из ключевых задач для развития новых перспективных реакторов на быстрых нейтронах, необходимых для создания замкнутого топливного цикла, является уменьшение интенсивности взаимодействия коррозионно-агрессивной среды тяжелого жидкого металлического теплоносителя (ТЖМТ) первого контура с конструкционными материалами реактора. По всему миру, в том числе и в России, продолжаются активные исследования коррозионной стойкости перспективных марок сталей и физико-химических свойств ТЖМТ для повышения долговечности и эффективности будущих коммерческих установок. Наряду с экспериментальными исследованиями [1, 2] активно развиваются и теоретические модели [3] для описания коррозионного взаимодействия конструкционных материалов и ТЖМТ. Разработка предиктивной физико-химической модели коррозионного поведения материалов в контакте с ТЖМТ должна позволить уменьшить число требуемых экспериментальных испытаний, упростить их анализ, обосновать интерпретацию их результатов, а значит, существенно сократить финансовые и временные затраты на обоснование режимов эксплуатации и выбор конструкционных материалов для будущих коммерческих реакторов.

В работе исследуется интенсивность растворения внутреннего слоя оксидной пленки (хромистой шпинели FeCr2O4), образующейся на поверхности ферритно-мартенситных сталей в контакте со свинцово-висмутовым теплоносителем, с помощью локально равновесного термодинамического подхода. Графическая схема учитываемых процессов в используемом локально равновесном термодинамическом подходе приведена на рис. 1. На ней изображен перепад концентраций примесей в ядре реактора и потоки элементов, которые он вызывает.

Мы показываем, что для поддержания низких скоростей растворения пленки необходимо соблюдать определенные концентрации примесей в ядре реактора. Приводятся оценки скорости растворения

внутреннего слоя оксидной пленки при базовых условиях эксплуатации охладительной системы реакторов на свинцово-висмутовом теплоносителе: темература 450–600℃, концентрация растворенного кислорода ~ 10^{-6} массовых процентов, скорость потока теплоносителя 0.5–2.5 м/с. Эта скорость оказывается достаточно низкой по сравнению со скоростью прорастания пленки вглубь стали. Также исследуется интенсивность растворения внутреннего слоя оксидной пленки в процессе процедуры, называемой водородная регенерация, при которой концентрация растворенного кислорода уменьшается до ~ 10^{-8} массовых процентов. В этом случае скорость оказывается достаточно высокой для того, чтобы учитывать ее при проведении водородной регенерации.

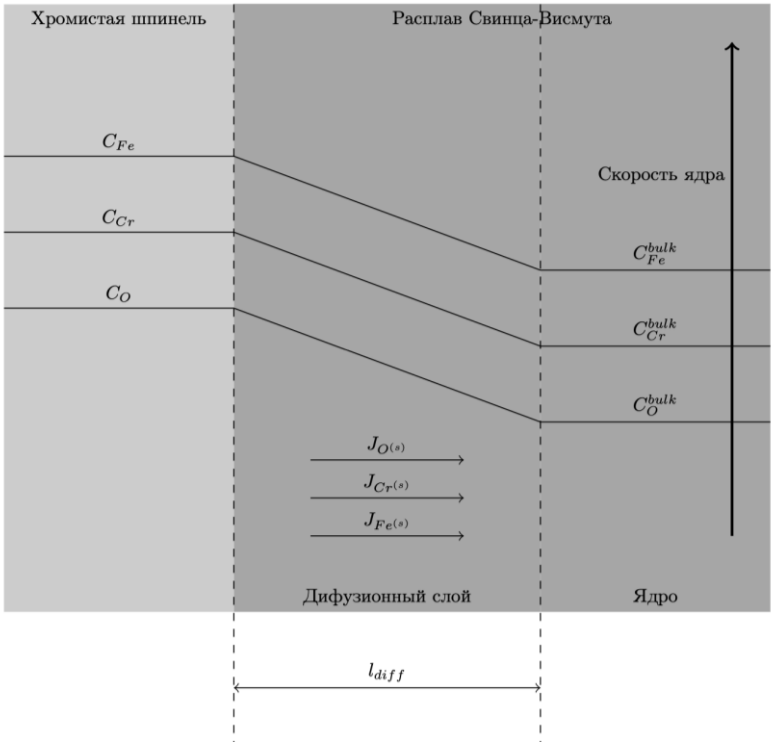


Рис. 1. Схема процессов в локально-равновесном термодинамическом подходе

Литература

1. NEA (2024), Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-hydraulics and Technologies. — Paris: OECD Publishing, 2015.
2. *Martinelli L.* [et al.]. Corrosion of t91 and pure iron in flowing and static pb-bi alloy between 450° c and 540° c: experiments, modelling and mechanism // Cor. Sci. 2020. V. 176: 108897.
3. *Fominykh N. A.*, *Nikolskiy V. P.*, *Stegailov V. V*. Atomic structure of conducting nanofilaments in TiO2 resistive switching memory // Comput. Mat. Sci. 2023. V. 220: 112061.

УДК 544.02

Квантово-химическое моделирование электронной структуры галогенидов иттербия при помощи методов связанных кластеров

***П. А. Хадеева*[1,2], *В. М. Шахова*[1], *Ю. В. Ломачук*[1], *Н. С. Мосягин*[1], *А. В. Титов*[1,2]**

[1]НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ
[2]Санкт-Петербургский государственный университет

Одним из распространенных способов моделирования электронной структуры материалов являются подходы, основанные на теории функционала плотности. Однако при исследовании оптических свойств материалов, содержащих в своем составе лантаноиды и актиноиды, невозможно добиться надежных результатов с необходимым уровнем точности. Данная проблема возникает в связи с тем, что электронная структура таких соединений имеет близкие по энергии уровни, часто возникают квазивырож-

дения, поэтому необходимо одновременно учитывать корреляционные и релятивистские эффекты. При помощи методов связанных кластеров можно добиться стабильных высокоточных результатов, однако возникает проблема необходимости проведения длительных по времени и требовательных к объемам оперативной памяти расчетов. В связи с этим была разработана новая технология изучения периодических соединений — CTEP (compound-tunable embedding potential) [1-3], которая дала возможность изучать кристаллические соединения методами связанных кластеров.

Однако данный подход все еще имеет ограниченные возможности ввиду его огромной вычислительной сложности, поэтому необходимо проводить пилотные расчеты на более простых системах. Одним из важных этапов исследования является проведение калибровки базисных наборов на молекулярных системах. Для этого были выбраны фториды и хлориды иттербия, так как в данных системах присутствует преимущественно ионная связь.

Значительный интерес данной работы представляет изучение химического сдвига (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС). Данное свойство было выбрано в качестве критерия проверки корректности воспроизведения электронной плотности вблизи тяжелого атома. Для каждого атома РЭС является характеристическим и высокочувствительным к электронному состоянию d- или f-элемента. Прямые методы вычисления ХС практически не применимы для исследования таких соединений, поэтому был разработан новый двухшаговый метод расчета [4].

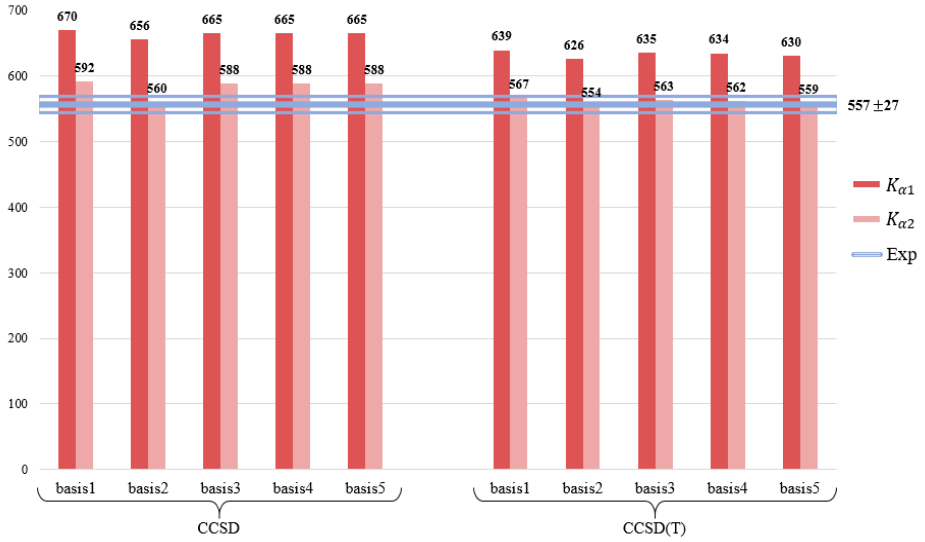


Рис. 1. Полученные значения ХС линий РЭС для фторидов иттербия

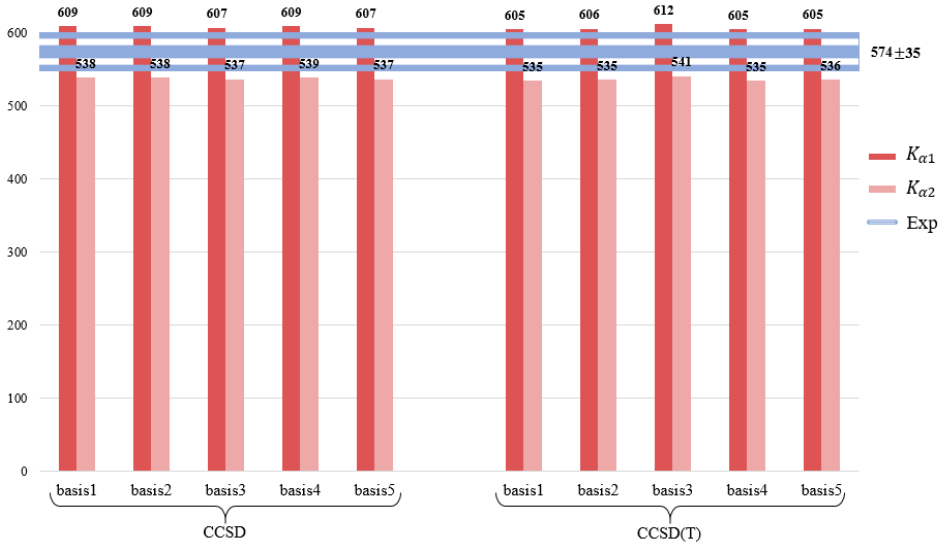


Рис. . Полученные значения ХС линий РЭС для хлоридов иттербия

Для выбранных молекулярных систем были вычислены структурные параметры, а именно длины связей Yb-Hal и углы между Hal-Yb-Hal. Также проведен расчет химических сдвигов линий $K_{\alpha1}$ и $K_{\alpha2}$ —

линий РЭС в молекуле $YbHal_3$ относительно молекулы $YbHal_2$ и изучена зависимость значения ХС от размера базисного набора на галогене, полученные результаты приведены на рис. 1 и 2. Рассматривались пять основных вариантов размеров базисных наборов на галогенах для проведения калибровки. (basis1 — 6-31G [5, 6]; basis2 — 6-31G [5, 6] с дополнительными диффузными 2s и 2p функциями; basis3 — 6-31G* [6, 7] с дополнительными диффузными 2s и 2p функциями; 6-31G(3df,3pd) [8] с дополнительными диффузными 2s и 2p функциями; basis5 — aug-cc-pVTZ [9, 10]). Результаты, полученные методами связанных кластеров CCSD и CCSD(T) показали, что для проведения точных расчетов необходимо учитывать диффузные s- и p-функции, а также поляризационные d и f. При добавлении одной f-функции в базисный набор на галогене полученные результаты практически не меняются, то есть была достигнута сходимость.

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 20-13-00225: https://www.rscf.ru/project/23-13-45028.

Литература

1. Shakhova V. M. [et al.]. Compound-tunable embedding potential method: analysis of pseudopotentials for Yb in YbF2, YbF3, YbCl2 and YbCl3 crystals // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. V. 24. P. 19333–19345.
2. *Lomachuk Y. V.* [et al.]. Compound-tunable embedding potential: which oxidation state of uranium and thorium as point defects in xenotime is favorable? // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22. P. 17922–17931.
3. *Maltsev D. A.* [et al.]. Compound-tunable embedding potential method and its application to calcium niobate crystal CaNb2O6 with point defects containing tantalum and uranium // Phys. Rev. B. 2021. V. 103: 205105.
4. *Lomachuk Y. V., Titov A. V.* Method for evaluating chemical shifts of x-ray emission lines in molecules and solids // PRA. 2013. V. 88(6): 062511.
5. *Hehre W. J., Ditchfield R., Pople J. A.* Self-Consistent Molecular Orbital Methods. XII. Further Extensions of Gaussian-Type Basis Sets for Use in Molecular Orbital Studies of Organic Molecules // J. Chem. Phys. 1972. V. 56. P. 2257–2261.
6. *Francl M. M.* [et al.]. Self-consistent molecular orbital methods. XXIII. A polarization-type basis set for second-row elements // J. Chem. Phys. 1982. V. 77. P. 3654–3665.
7. *Hariharan P. C., Pople J. A.* The influence of polarization functions on molecular orbital hydrogenation energies // Theor. Chim. Acta. 1973. V. 28. P. 213–222.
8. *Curtiss L. A.* [et al.]. Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms // J. Chem. Phys. 1998. V. 109. P. 7764–7776.
9. *Dunning T. H.* Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 1007–1023.
10. *Woon D. E., Dunning T. H.* Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. III. The atoms aluminum through argon // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 1358–1371.

УДК 539.2

Автоматический поиск корреляций физических величин на основе синтетических данных

***Р. И. Хузин*[1], *М. А. Орехов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Изучение причинно-следственных связей между физическими величинами — одна из основных задач физики. Использование методов машинного обучения может помочь существенно продвинуться в этом. Это особенно актуально в связи с возможностью получать большие массивы расчетных (синтетических) данных с применением метода молекулярной динамики.

В данной работе рассмотрено применение методов машинного обучения на примере задачи описания результатов молекулярно динамического моделирования энергий гидратации молекул.

Работа посвящена определению значимости различных свойств молекул для описания ее энергии гидратации в молекулярно динамических моделях.

Для этой цели написаны программы для обработки результатов моделирования и получения из них рассматриваемых параметров. Дипольный момент и радиус гирации молекулы вычислялись с использованием самостоятельно написанного кода, анализирующего данные расчетных файлов LAMMPS. Объем молекулы вычислялся по SMILES-строке с использованием модуля rdkit. Для оценки важности признаков использовался Random Forest Classifier.

Ниже приведены полученные значения для некоторых параметров молекулы.

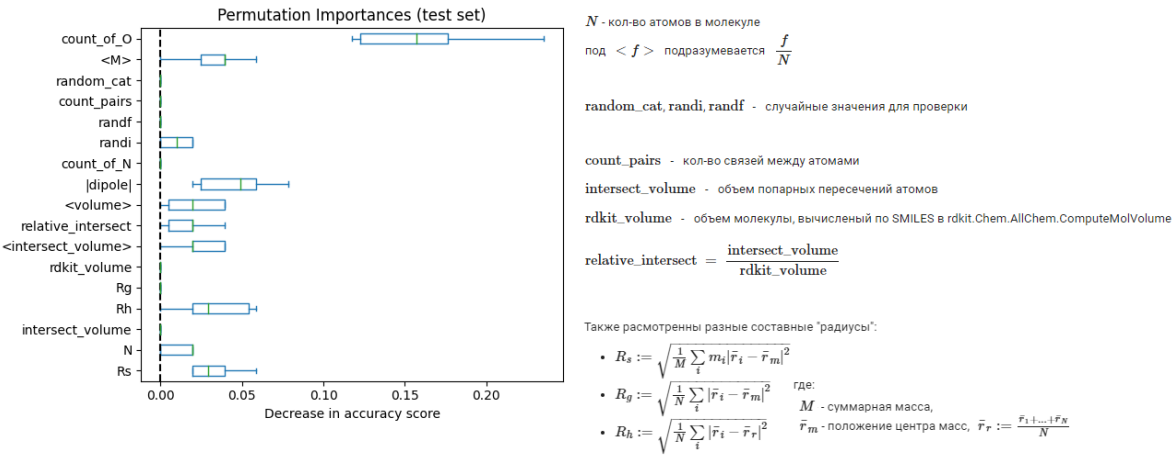


Рис. 1. Значимость признаков для описания энергии гидратации молекулы

Для проверки применяемого метода анализа значимости признаков проведено сравнение значимости физических признаков молекулы (дипольного момента, радиуса гирации, массы) и случайного числа. Применяемый метод показал отсутствие корреляции результатов молекулярной динамики и случайных чисел, что подтверждает корректность применяемого метода.

Из анализа данных молекулярной динамики выявлена высокая значимость количества атомов кислорода в молекуле, дипольного момента и радиуса молекулы для описания энергии гидратации. Данные выводы согласуются с упрощенными моделями для энергии гидратации.

УДК 577.38

ARTEMIS: изучение аллостерической коммуникации биомолекул

Р. А. Маллаев, А. А. Полянский

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

Аллостерическая коммуникация является важным внутренним механизмом биомолекулярных систем, регулирующим взаимодействие белков в клеточной среде. Например, связывание эффектора в аллостерическом сайте фермента приводит к конформационным изменениям, благодаря которым происходит изменение конфигурации активного центра и его каталитической активности. Изучение аллостерии имеет фундаментальное значение и помогает в понимании болезней, разработке лекарств и описании физиологической передачи сигналов клетками [1].

Мы предлагаем универсальный теоретико-информационный подход исследования аллостерической коммуникации, реализованный в виде написанного на Python/C++ пакета программ ARTEMIS (https://github.com/nalsur-veallam/ARTEMIS). В основе метода лежит анализ матрицы взаимной информации для всех пар остатков внутри белка, полученной по данным молекулярной динамики (МД) при помощи пакета программ PARENT [2].

Сначала получают конформационные ансамбли в ходе расчета МД. Расчеты проводят во внутренних координатах (связи, углы, двугранные углы), чтобы избежать лишних корреляций в декартовых координатах, связанных с поступательными движениями. По данным МД рассчитывают распределения для каждой внутренней степени свободы, а также для каждой пары степеней свобод, что позволяет получить значения энтропии и взаимной информации. Расчет взаимной информации для исследуемой системы проводится дважды с разным количеством состояний из одного и того же ансамбля. Это делается для того, чтобы отфильтровать зависящую от количества кадров траектории МД вычислительную ошибку PARENT, которая обусловлена конечностью выборки и методом численного интегрирования.

Отличительной особенностью этого метода является то, что априори не делается никаких предположений о конкретном строении молекулы и характере самой связи. Это позволяет использовать ARTEMIS для изучения неупорядоченных и неструктурированных систем. Исследуя матрицу взаимной информации 2D, можно определить сильно связанные позиции (остатки) в биомолекуле (например, в белке), реконструировать коммуникационную сеть, охарактеризовать возмущение, вызванное взаимо-

действующим партнером, а также оценить специфический вклад различных молекулярных участков в коммуникацию.

Мы апробировали ARTEMIS на наборе модельных белков различного размера (10^2–$3 \cdot 10^4$ атомов в молекуле) и структурной организации, для которого были получены соответствующие МД траектории (суммарно более 50 мкс). Результаты анализа аллостерической коммуникации были сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными. В частности, выявленный в глюкокиназе человека (PDB ID: 1V4S) аллостерический сайт включает ряд остатков, установленных ранее эмпирически [3].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 23-14-00313.

Литература

1. *Verkhivker G. M.* [et al.]. Allosteric Regulation at the Crossroads of New Technologies: Multiscale Modeling, Networks, and Machine Learning // Front. Mol. Biosci. 2020. V. 7: 136.
2. *Fleck M., Polyansky A. A., Zagrovic B*. PARENT: A Parallel Software Suite for the Calculation of Configurational Entropy in Biomolecular Systems // J. Chem. Theory Comput. 2016. V. 12(4). P. 2055–2065.
3. *Kamata K.* [et al.]. Structural Basis for Allosteric Regulation of the Monomeric Allosteric Enzyme Human Glucokinase // Structure. 2004. V. 12(3). P. 429–438.

УДК 538.9, 004.89

Улучшение прогнозирующей способности моделей машинного обучения через расширение признакового пространства с использованием расчетов ThermoCalc

И. С. Трофимов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящее время одним из самых надежных и широко используемых подходов к поиску новых видов стали является селективный метод, который заключается в определении состава с наилучшими характеристиками с помощью экспериментальных зависимостей. Однако этот метод является дорогостоящим и продолжительным, и его сложно адаптировать для автоматизации. Благодаря машинному обучению и применению алгоритмов оптимизации можно значительно сократить временные и финансовые затраты на этот процесс, а также ускорить его.

Методы и алгоритмы машинного обучения для предсказания различных свойств сталей известны. Решая задачу регрессии, можно использовать случайный лес, линейную регрессию, бустинг и даже нейросети [1, 2]. Умея предсказывать свойство сталей, можно провести процедуры генетической оптимизации, для поиска новых составов [3].

Чтобы обеспечить прочность, важная такая механическая характеристика, как предел текучести поэтому именно он был выбран в качестве целевого параметра. В качестве входных данных были выбраны концентрации различных химических элементов, входящих в состав стали, параметры термической обработки, время проведения измерения и температура, при которой проводилось измерение.

В настоящей работе был предложен способ расширения признакового описания с помощью признаков, посчитанные в программе ThermoCalc. Дополнительные признаки включают в себя концентрации и размеры различных карбидов в составе. При подсчитывании этих признаков было учтена зависимость от термообработки, что делала эти признаки более полными и точными.

Поскольку при таком подходе скорость предсказания существенно замедляется, из-за необходимости ставить термодинамический расчет, было принято решение обучиться предсказывать эти свойства. Таким образом, полная последовательность предсказания на конкретном составе выглядит следующим образом: на вход подаются состав и параметры термообработки, затем несколько регрессионных моделей предсказывают признаки ThermoCalc, после чего головная модель агрегирует все признаки и выдает финальное значение целевого признака.

В табл.1 приведены результаты экспериментов. Жирным шрифтом выделена ошибка модели по RMSE для предлагаемого подхода. Можно сделать вывод о качественном улучшении признакового пространства с помощью посчитанных в ThermoCalc свойств, а также о том, что подход с предсказанием этих признаков не дает существенного ухудшения в качестве моделей.

После того как лучшая модель была найдена, следующим шагом стала оптимизация для поиска составов с наилучшими свойствами. Эта оптимизация проводилась с использованием генетического

алгоритма, который включает в себя последовательное применение таких операций, как мутация, наследование, скрещивание и случайное создание индивида.

Т а б л и ц а . 1. Сравнение разных алгоритмов

Подход	RMSE, MPa. (Предел текучести)
Состав + термообработка	78,9 ± 10,9
Состав + термообработка + ThermoCalc (истинные)	**65,4 ± 9,3**
ThermoCalc (истинные)	87,2 ± 11,3
Состав + термообработка → ThermoCalc	73,9 ± 11,4
Состав + термообработка + ThermoCalc (предсказанные)	**65,9 ± 9,3**

С помощью процедуры генетической оптимизации был найден состав, с уникальным пределом текучести, равным 975 МПа, который превосходит все, что наблюдалось в обучающей выборке.

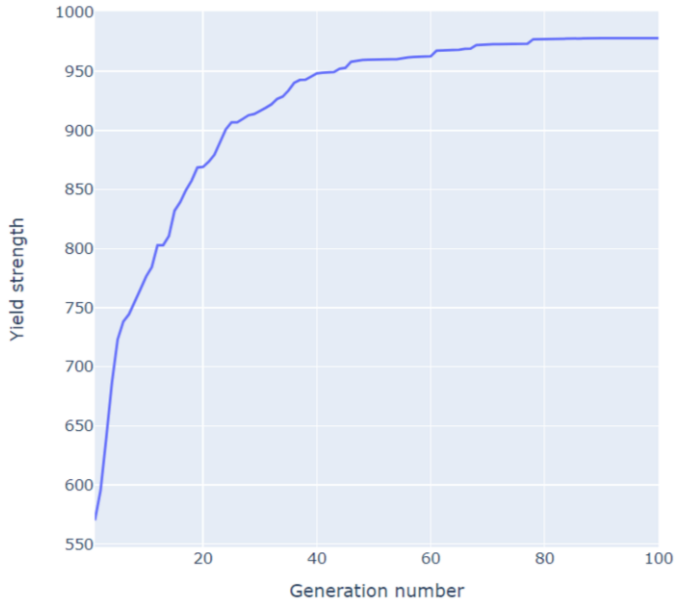


Рис. 1. Сходимость генетического алгоритма

Литература

1. *Liu C.* [et.al.]. Optimal Design of the Austenitic Stainless-Steel Composition Based on Machine Learning and Genetic Algorithm // Materials (Basel). 2023. V. 16(16): 5633.
2. *Chang Y. J.* [et al.]. Prediction of the Composition and Hardness of High-Entropy Alloys by Machine Learning // JOM: the journal of Minerals, Metals & Materials Society. 2019. V. 71(5). P. 3433–3442.
3. *Xu X.* [et al.]. Predicting Tensile Properties of AZ31 Magnesium Alloys by Machine Learning // JOM: the journal of Minerals, Metals & Materials Society. 2020. V. 72(11). P. 3935–3942.

УДК 538.9

Молекулярно-динамическая модель связывающего лед белка

Р. Е. Цинявский, В. В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Белки антифризы помогают живым организмам выживать в условиях отрицательной температуры. Исследование таких белков началось в 1960-х гг. с их обнаружения в крови антарктической рыбы. На сегодняшний день подтвержден синтез аналогичных протеинов и другими рыбами, а также растениями, насекомыми и бактериями. Были исследованы их структурные особенности, обуславливающие замедление образования льда. Интерес к ним не угас и по сей день, что может быть связано с появлением новых

инструментов исследования и потенциальным применением подобных белков в криопрезервация клеток, агрокультуре, пищевой промышленности и урбанистике [1].

Характерным проявлениям наличия белков антифризов является торможением роста кристаллов льда. Выраженность эффекта сильно зависит от типа белка, его ориентации относительно льда и направления роста кристаллов. Обычно эффект проявляется только в одной из кристаллической плоскости льда 1h, чаще всего это главная призматическая плоскость.

В докладе будут представлены результаты молекулярно-динамического моделирования белка антифриза FfIBP [2] (Flavobacterium frigoris Ice-Binding protein), обнаруженного в антарктической бактерии Flavobacterium frigoris. Модель включает в себя белок в воде в присутствии льда Ih, как показано на рис. 1. В качестве модели воды и льда используется модель TIP4P/Ice [3]. Для моделирования белка используется силовое поле CHARMM27 [4].

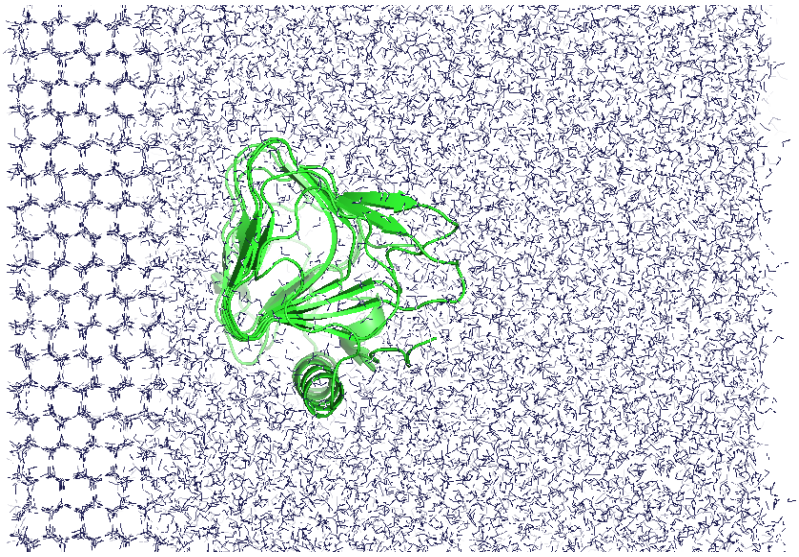


Рис. 1. Один кадр на траектории молекулярной симуляции

Литература

1. *Bar Dolev M., Braslavsky I., Davies P. L.* Ice-binding proteins and their function // Annual review of biochemistry. 2016. V. 85. P. 515–542.
2. *Do H.* [et al.]. Structure-based characterization and antifreeze properties of a hyperactive ice-binding protein from the Antarctic bacterium Flavobacterium frigoris PS1 // Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography. 2014. V. 70(4). P. 1061–1073.
3. *Abascal J. L. F.* [et al.]. A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice // The Journal of chemical physics. 2005. V. 122(23): 234511.
4. *Feller S. E., MacKerell A. D.* An improved empirical potential energy function for molecular simulations of phospholipids // The Journal of Physical Chemistry B. 2000. V. 104(31). P. 7510–7515.

УДК 577.22

Нейротоксин BeKm-1 блокирует каналы hERG при помощи незаменимого остатка аргинина: анализ *in silico* модели комплекса

***Я. И. Заварзина*[1], *А. А. Василевский*[1,2], *А. О. Чугунов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт биоорганической химии им. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН

Ионный ток через калиевый канал hERG (Kv11.1) можно заблокировать пептидным нейротоксином BeKm-1 из яда скорпиона *Mesobuthus eupeus*. Несмотря на то, что структуры hERG и BeKm-1 по отдельности получены экспериментально, структура их комплекса до сих пор неизвестна; а ее определение могло бы внести весомый вклад в изучение разнообразия калиевых каналов и разработку лекарств (канал hERG задействован в регуляции сердечного ритма). Более того, hERG гомологичен калиевому каналу

EAG (гиперэкспрессируется в различных опухолевых клетках), для которого эффективные высокоаффинные блокаторы неизвестны, и наличие точной модели поможет разработке противоопухолевых препаратов.

В данном исследовании мы использовали молекулярную динамику (МД) и ансамблевый докинг, направляемые результатами двойного мутагенеза [1], чтобы предсказать структуру комплекса hERG–BeKm-1. Наша модель выявляет ключевую роль остатка токсина Arg20, который формирует три одновременных взаимодействия (солевой мост и водородные связи) с вестибюлем канала. Мы валидировали модель комплекса путем *in silico* мутации Arg20 на Lys: анализ траекторий МД показал, что даже такая «несущественная» замена заметно нарушает взаимодействие пептида с каналом. Это наблюдение было подтверждено и *in vitro*: пептид BeKm-1^{R20K}, полученный в бактериальной системе экспрессии, значительно снизил сродство к каналу hERG. Наша модель комплекса hERG–BeKm-1 может использоваться для проектирования лекарств: в частности, путем моделирования по аналогии комплекса EAG–BeKm-1 мы проводим редизайн токсина для придания ему специфичности к этому родственному каналу, что позволит создать прототип нового лекарства от ряда онкологических заболеваний.

Литература

1. *Tseng G. N.* [et al.]. Probing the outer mouth structure of the hERG channel with peptide toxin footprinting and molecular modeling // Biophys J. 2007. V. 92. P. 3524–3540.

Секция фундаментальных проблем физики квантовых технологий

Председатель: Г. Б. Лесовик (д.ф.-м.н., с. н. с., зав. лабораторией)

Зам. председателя: Д. А. Кронберг (к. ф.-м. н.)

Секретарь: С. Ю. Цовьянов

Дата: 02.04.2024 Время: 11:00

УДК 530.145

Исследование декогеренции в полупроводниковых двухточечных наноструктурах

***А. Е. Бердашкевич*[1], *Л. Е. Федичкин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН

Квантовые устройства, на базе твердотельных наноструктур, считаются кандидатами для крупномасштабных квантовых вычислений. В качестве варианта реализации предлагается к рассмотрению конструкция, в которой квантовая информация кодируется в пространственные степени свободы электронов, помещенных в квантовую точку. В качестве преимущества подобных устройств отметим, что двухточечные системы в полупроводниках могут быть относительно хорошо защищены от процессов декогеренции благодаря взаимодействию с фононной средой и электромагнитными полями [1].

Один из вариантов процесса изготовления данного устройства заключается в реализации FinFETтранзистора: за вытравливанием из кремниевой подложки (обозначенной на рис. 1 бордовым цветом) так называемого ребра — активной области, в которой будет расположен электрон, следует формирование композитного слоя SiO_2 и диэлектрика свысоким показателем диэлектрической проницаемости (песчаный цвет). Затем наносятся тонкие металлические вентили (обозначены серым цветом), требующиеся дляформирования квантовой точки и управления.

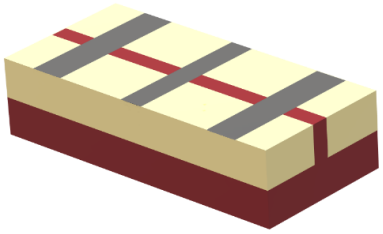


Рис. 1. Предполагаемая схема промышленной реализации квантовой точки

Рассматриваемая нами структура состоит из двух квантовых точек, связанных между собой туннельным барьером, а также одиночного электрона, перемещающегося между ними (см. рис. 2). Мы подвергаем рассмотрению структуры, где энергия перехода на верхний уровень много больше энергии между двумя основными уровнями, а также температуры среды. Это позволяет сосредоточиться на основных уровнях в каждой точке.

Для оценки когерентности кубита, сначала необходимо оценить скорость релаксационных процессов, связанных с обменом энергией. Интенсивность излучения фотона, расположенного вблизи границы двух сред, с разными показателями диэлектрической проницаемости и усредненная за период колебаний, представляется как:

$$I = \frac{8}{3}\frac{\omega^4 d^2}{c^3 \varepsilon_1^2}\frac{\varepsilon_1^2 \sin^2\theta_d + \varepsilon_2^2 \cos^2\theta_d}{(\varepsilon_1+\varepsilon_2)^2}, \quad (1)$$

здесь ω — частота перехода между уровнями, d — дипольный момент уровнями, c — скорость света, θ_d — угол между диполем и нормалью к плоскости, ε_1 и ε_2 — показатели диэлектрической проницаемости, c — скорость света.

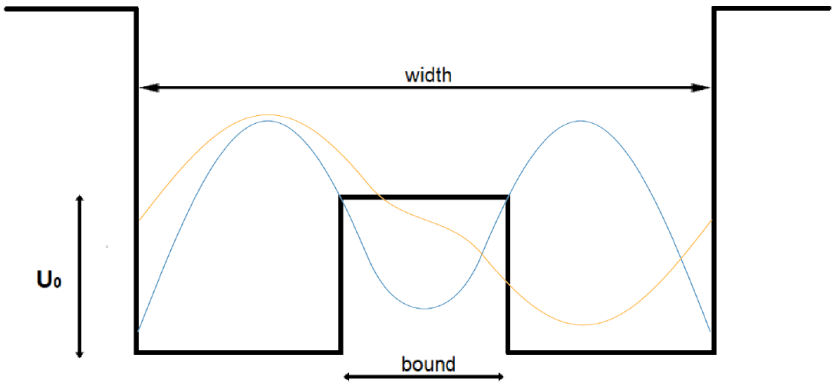


Рис. 2. Одиночный электрон в пределах потенциала с двумя ямами

Дипольный момент определятся как:

$$d_{01} = \int_{-\frac{width}{2}}^{\frac{width}{2}} \psi_0 ex \psi_1 \, dx \,. \tag{2}$$

Здесь d_{01} — дипольный момент уровней 0 и 1, ψ_0 и ψ_1 — волновых функций, соответствующих нахождению электрона в первой или второй яме соответственно.

Также нам необходимо рассмотреть релаксационный процесс, возникающий как следствие деформаций, вызванных акустическими фононами, т. е. исследуется взаимодействие с акустическими фононными модами [2, 3].

Вероятность декогеренции представляется как:

$$W = (\Xi_c)^2 \frac{\omega^3 n^3}{3\pi\hbar\rho c^3 s^2}. \tag{3}$$

Здесь W — частота перехода между уровнями, ω — частота перехода между уровнями, ρ — плотность, c — скорость света, s — скорость звука, n — показатель преломления, $\hbar$ — постоянная планка, Ξ_c — константа деформационного потенциала.

Литература

1. *Melnikov A. A., Fedichkin L. E.* Quantum error correction in silicon charge qubits // Микроэлектроника. 2013. Т. 42. С. 148–154.
2. *Fedichkin L. E., Yanchenko M., Valiev K. A.* Coherent charge qubits based on GaAs quantum dots with a built-in barrier // Nanotechnology. 2000. V. 11. P. 387–391.
3. *Fedichkin L. E., Fedorov A.* Error rate of a charge qubit coupled to an acoustic phonon reservoir // Phys. Rev. 2004. V. 69: 032311.

УДК 535.547, 535-46, 535-45, 535.015

Реализация генератора случайных чисел на одиночных фотонных состояниях при помощи бифотонов

А. Д. Мищенко, А. Д. Забродин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Поскольку случайность присуща квантовой физике, генератор случайных чисел, построенный на основе какого-либо квантовомеханического процесса, мог бы обеспечить истинную случайность. Наглядным примером этого служит определение, какой из двух детекторов сработал после попадания фотона на

делитель 50/50. Однако в силу отсутствия эффективных источников одиночных фотонов экспериментаторы вынуждены использовать более сложные оптические схемы [1].

Для реализации генератора случайных чисел мы предлагаем схему, показанную на рис. 1. После прохождения через нелинейный кристалл лазерного луча с длиной волны 405 нм, в результате спонтанного параметрического рассеяния, образуются скоррелированные пары фотонов с длиной волны 810 нм [2]. Наблюдается фазовый синхронизм первого типа. Далее луч света попадает на делитель 50/50, после чего один из лучей выступает в роли индикатора фотонной пары, а второй пучок разделяется на два равных по интенсивности при помощи комбинации пластины $\lambda/2$ и призмы Волластона, выступающей в роли делителя 50/50.

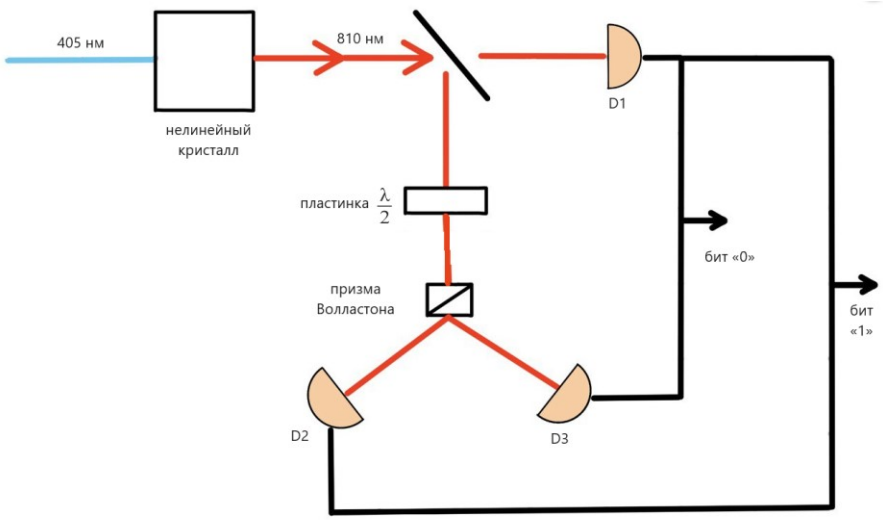


Рис. 1 Схема установки

Фотоны с трех полученных пучков улавливаются однофотонными детекторами. Генерация случайных бит происходит в результате срабатывания компаратора между детектором индикаторного фотона D1 и детекторами D2/D3. При срабатывании компаратора между D1 и D2 в память микрокомпьютера записывается бит «1», при срабатывании D1 и D3 записывается бит «0».

В данной схеме предлагается использовать излучение 405 нм лазерной указки мощностью 50 мВт, что позволяет получать порядка 10^6 пар фотонов в секунду.

Ввиду того что детекторы D1 и D2 срабатывают равновероятно и независимо, предложенная схема является примером генератора случайных чисел с высокими показателями случайности, при этом обеспечивая высокую скорость генерации.

Литература

1. *Kwon O., Cho Y., Kim Y.* Quantum random number generator using photon-number path entanglement // Appl. Opt. 2009. V. 48. P. 1774–1778.
2. *Клышко Д. Н.* Фотоны и нелинейная оптика. — М.: Наука, 1980.

УДК 003.26

Связь основных информационных величин с параметрами пост-обработки в условиях квантовой криптографии

А. И. Пьянков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Квантовая криптография использует квантовые состояния для передачи информации, ее безопасность следует из невозможности измерения или клонирования без внесения изменений в квантовое состояние перехватчиком [1]. По наблюдаемым параметрам, можно оценить величину информации, полученную перехватчиком, после чего если величина информации мала, то можно перейти к классическим

методам шифрования, которые позволят создать классический секретный ключ с необходимыми параметрами секретности.

В рассматриваемом протоколе предполагается что перехватчик получает не весь рассеянный свет, так как в действительности большинство рассеяния происходит на помехах в канале которые равномерно распределены по всей линии. Получение информации из столь некоррелированного шума перехватчиком (Евой) невозможно при установлении физического контроля линии при помощи методов линейной томографии и последующим сравнением получаемых томограмм [2].

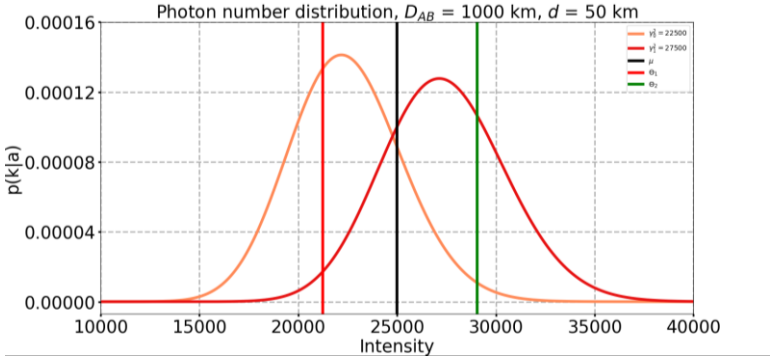


Рис. 1. Возможный вид вероятностного распределения по модам с первичной пост-селекцией

В описанном выше протоколе используется кодирование при помощи интенсивности. Рассматривается пост-селекция кросс мод, а также добавляется селекция маловероятных мод. Мною было рассмотрено влияние второго вида пост-селекции на скорость генерации ключа и другие информационные параметры, а также реализована вычислительная составляющая необходимая для верного подсчета информационных параметров [3].

В качестве результата будут рассмотрены графики зависимостей от параметров пост-селекции, показывающие увеличение параметров протокола при использовании пост-селекции, отсекающей маловероятную часть спектра.

Литература

1. *Bennett C. H., Brassard G*. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing // Theoretical computer science. 2014.V. 560. P. 7–11.
2. *Tateda M., Horiguchi T*. Advances in optical time domain reflectometry // Journal of lightwave technology. 1989. V. 7. № 8. P. 1217–1224.
3. *Kirsanov N. S.* [et al.]. Forty Thousand Kilometers Under Quantum Protection // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2301.10610v2.

УДК 53.091, 53.093, 53.096, 53.097

Исследование источника энтропии на базе лавинного пробоя в P–N-переходе при различных внешних воздействиях

В. В. Царук

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Квантовые генераторы случайных чисел являются неотъемлемой частью систем квантового распределения ключей [1].

В связи с важностью секретной передачи информации, например в банковском деле, перед системой распределения ключей выдвигается ряд требований, наиважнейшее из которых — стабильность работы, это требование применяется ко всем компонентам системы, в том числе к генератору случайных чисел.

Любой физический генератор случайных чисел не обходиться без источника энтропии — источника случайности. В настоящее время одним из самых распространенных источников энтропии для квантового генератора случайных чисел служит лавинный пробой в P–N-переходе, в виду его относительно малой стоимости и компактности [2, 3].

В рамках работы изучается стабильность работы источника энтропии при различных воздействиях: вибраций, температуры, света, влажности, инжектированные наводок в цепи питания. Были собраны установки для реализации воздействий.

Предполагаемое распределение сигнала с источника энтропии после обработки — нормальное, оно остается таким при всех внешних воздействиях, пример отнормированной гистограммы распределения и его аппроксимации нормальным распределения при температуре 8.9°C ,относительной влажности 60%, помехах в питании < 20 mV ,в отсутствие света можно увидеть на рис. 1.

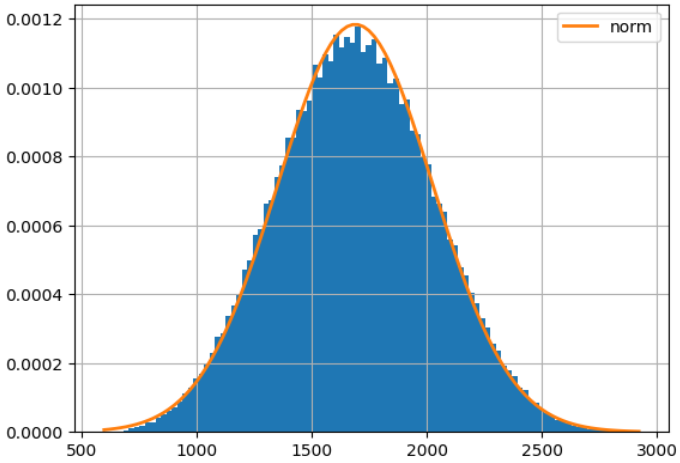


Рис. 1 Аппроксимация гистограммы нормальным распределением

Воздействие посредством света модулированного частотой от 0 до 12 кГц , вибраций (в частотах от 2 до 25 кГц),изменением влажности(от 30 до 85 %) не оказало заметного влияния на сигнал.

Воздействие температуры дало значимые результаты (рис 2,рис 3, рис 4).

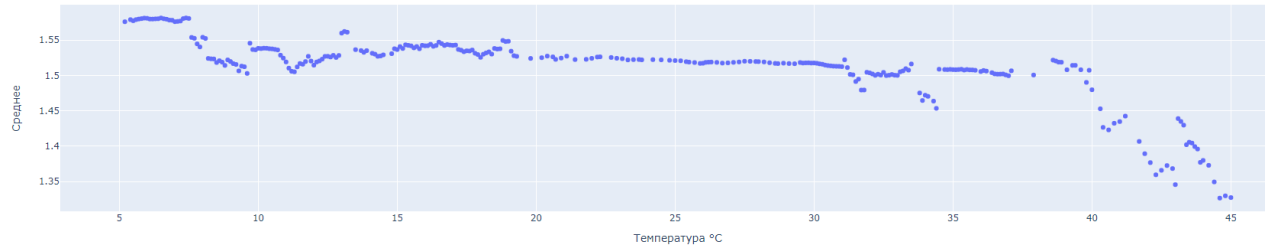


Рис. 2 Зависимость среднего значения сигнала от температуры

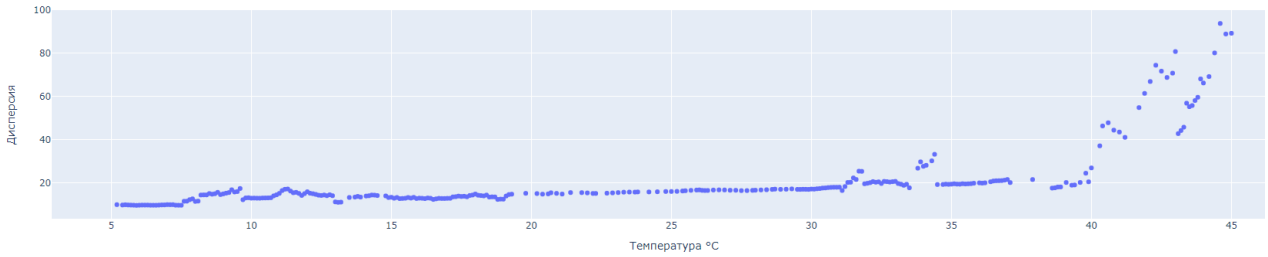


Рис. 3. Зависимость дисперсии сигнала от температуры

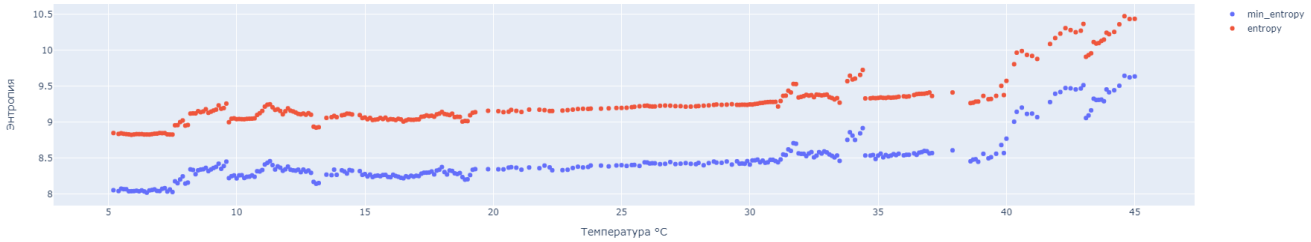


Рис. 4. Зависимость энтропии и минимальной энтропии от температуры

Инжектированние синусоидальных наводок амплитудой 100 mV, дало сильные корреляции при частотах от 10 кГц (измерено до 51 кГц).

Литература

1. *Schiavon M., Vallone G., Villoresi P.* Experimental realization of equiangular three-state quantum key distribution // Sci. Rep. 2016 V.6(1): 30089. DOI:10.1038/srep30089.
2. *Stipčević M., Koç Ç. K.* True Random Number Generators // Open Problems in Mathematics and Computational Science. — Cham: Springer, 2014. P. 275–315. DOI:10.1007/978-3-319-10683-0_12.
3. *Lampert B.* [et al.] Robust, low-cost, auditable random number generation for embedded system security // in Proc. 14th ACM Conf. Embedded Netw. Sensor Syst. — Stanford: ACM, 2016. P. 16–27. DOI: 10.1145/2994551.2994568.

УДК 530.145.82

Использование своп теста для верификации запутанности квантовых систем методом запутанных многогранников

В. А. Орлов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Квантовая запутанность является отличительным свойством квантовых систем и представляет собой основной ресурс для квантовых вычислений. Значительные усилия направлены на получение описания системных характеристик многочастичной запутанности. Часто исследователям необходимо преобразовать одно запутанное состояние в другое. Такая ситуация приводит к необходимости нахождения способов определения различных классов эквивалентности запутанности. Классификация запутанности важна с экспериментальной точки зрения тем, что состояния, принадлежащие к одному классу, подходят для выполнения одной и той же задачи. Реализация некоторых типов состояний может быть значительно проще и дешевле [1].

Одним из самым часто использующихся на практике методов является томография квантовых состояний. Метод требует проведения большого количества измерений, для чего готовится ансамбль идентичных состояний. Для N-кубитовых систем количество требуемых измерений обычно составляет порядка 3^n. Матрица плотности растет экспоненциально с размером системы, поэтому этот метод становится технически недоступным для больших систем [2].

В [1] предложен подход для характеризации и классификации запутанности, основанный на геометрии пространства собственных значений и локальных измерениях подсистем. Он получил название — метод запутанных многогранников. Вычислительная сложность метода растет линейно с ростом размерности. Известно, что метод запутанных многогранников требует высокого уровня чистоты исходных состояния. Однако экспериментально невозможно реализовать идеальные кубиты и квантовые вентили. Возникает потребность исследования влияния факторов шума на чистоту состояния. Для измерения чистоты состояний был выбран своп тест, модернизированный для верификации системы на наличие запутанности [2]. Вычислительная сложность своп теста также растет линейно с ростом размерности, однако для его реализации требуется создать копию состояния и двухкубитовые вентили, а определение классов запутанности масштабируется хуже, чем при томографическом методе, в этом он может быть дополнен методом запутанных многогранников.

В качестве первичных вентилей ((англ.) native gate) были выбраны однокубитовые и двукубитовые вентили поворота $R_{x,y,z}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\theta\sigma_{x,y,z}}{2}\right)$ и $R_{xx,yy,zz}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\theta\sigma_{xx,yy,zz}}{2}\right)$, соответственно, где σ_i — матрицы Паули, а σ_{ii} — тензорное произведение двух матриц Паули. Такие первичные вентили часто используются экспериментально [3].

Влияние ошибок приготовления запутанных состояний на результаты своп теста было рассмотрено в [2]. Однако авторами не были рассмотрены шумы, вносимые самим своп тестом. В представленной работе была проведена симуляция шумов, разбитых на 3 класса: ошибки измерения состояния, когерентный и некогерентный шум.

При ошибке измерения наблюдаем с помощью измерительного прибора 0 с вероятностью g и 1 с вероятностью $1-g$, если истинное значение — это 0. Если истинное значение равно 1, то наблюдаем 1 с вероятностью g и 0 с вероятностью $1-g$. Шумную версию вентиля поворота обозначим как $\tilde{R}_{x,y,z}(\theta) = R_x(\theta+\varepsilon)$, что означает, что вентиль поворота вращает состояние не точно на угол θ вокруг

указанной оси, а на немного отличный угол $\theta + \varepsilon$. Тогда зашумленный вентиль можно записать, как произведение идеального вентиля и некоторого другого вентиля, ответственного за шум: $\tilde{R}_x(\theta) = R_x(\theta)R_x(\varepsilon)$. Такой тип шума называется когерентным. Аналогично вводится когерентный шум для двукубитовых вентилей поворота $\tilde{R}_{xx,yy,zz}(\theta)$, , которые поворачивают состояние на немного больший угол $\theta + \xi$. Некогерентный шум представлен деполяризирующим каналом $\Lambda(\rho_0) = \left(1 - \frac{3p'}{4}\right)\rho_0 + \frac{p'}{4}X\rho_0 X + \frac{p'}{4}Y\rho_0 Y + \frac{p'}{4}Z\rho_0 Z$, где ρ_0 — это матрица плотности состояния до действия деполяризирующего канала, X, Y, Z — вентили Паули, p' — вероятность действия некогерентного шума.

Сумма максимальных собственных значений для трехкубитовых состояний класса GHZ лежит в диапазоне $1{,}5 - 3$, а для класса W в диапазоне $2 - 3$. Метод запутанных многогранников накладывает серьезные ограничения на значение чистоты [1]. Для него выполняется неравенство $\sum_k \left|\lambda_{max}^{(k)}(\rho') - \lambda_{max}^{(k)}(\rho)\right| \leq \frac{N}{2}\left(1 - \sqrt{2p-1}\right)$, где $\lambda_{max}^{(k)}$ — это максимальное собственное значение k-той N-кубитовой редуцированной матрицы плотности чистого состояния ρ или его зашумленной версии ρ', $p = \mathrm{Tr}(\rho'^2)$ — показатель чистоты. Возникает проблема, что получаемые собственные значения лежат вне границ многогранника. Например, для трехкубитовых состояний при значениях показателя чистоты $p \leq \frac{13}{18}$ исследователи не смогут достоверно узнать, что состояние не принадлежит классу W, при $p \leq \frac{5}{9}$ исследователи никогда достоверно не детектируют класс W, а при $p \leq \frac{1}{2}$ никогда достоверно не детектируют класс GHZ.

Графики зависимости показателя чистоты p от параметров, ответственных за шум, ε, ξ, p', g для трехкубитовых состояний W и GHZ представлены на Рис. 1 и Рис. 2. Зависимости p от p', g не различимы для W и GHZ. Фиолетовыми, красными и голубыми крестами обозначены точки, в которых p принимает значения $\frac{13}{18}, \frac{5}{9}$ и $\frac{1}{2}$ соответственно. Видно, что при пороговых ошибках, необходимых для запуска кодов коррекции ошибок, чистота состояний после действия своп теста достаточна для полноценного использования метода запутанных многогранников [4].

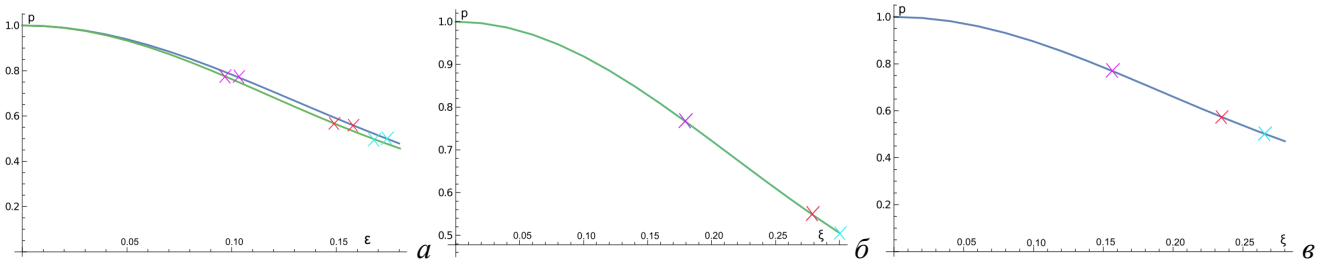


Рис. 1. Зависимость показателя чистоты p от параметра когерентного шума (*а*) ε однокубитового вентиля поворота для состояний W (зеленый) и GHZ (синий) (*б*) ξ двукубитового вентиля поворота для состояния W (*в*) ξ двукубитового вентиля поворота для состояния GHZ

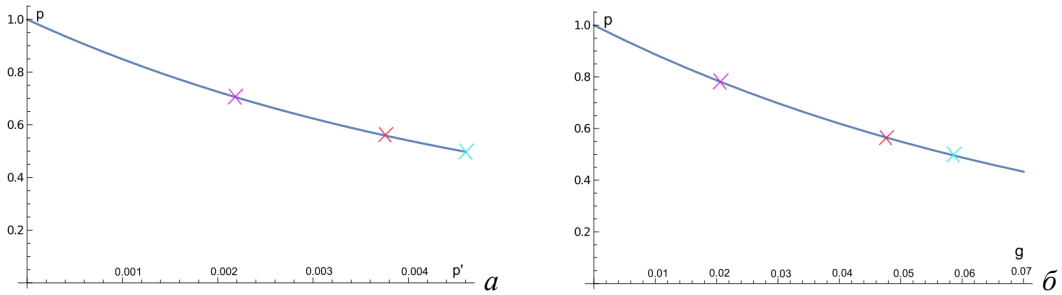


Рис. 2. Зависимость показателя чистоты p состояний W и GHZ (*а*) от параметров некогерентного шума p' (*б*) от параметра ошибки измерения g

Литература

1. *Walter M.* [et al.] Entanglement polytopes: multiparticle entanglement from single-particle information // Science. 2013. V. 340(6137). P. 1205–1208.
2. *Foulds S.* [et al.] The controlled SWAP test for determining quantum entanglement // Quantum Science and Technology. 2021. V. 6(3): e035002.

3. *Aksenov M. A.* [et al.] Realizing quantum gates with optically addressable $^{171}Yb^{+}$ ion qudits // Physical Review A. 2023. V. 107(5): e052612.
4. *Stephens A. M.* Fault-tolerant thresholds for quantum error correction with the surface code // Physical Review A. 2014. V. 89(2): e022321.

УДК 535.24

Использование провала Манделя в квантовой фотометрии

В. А. Мещеряков, А. А. Гаврилов, М. В. Лебедев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

До сегодняшнего дня одной из основных проблем квантовой фотометрии была ее зависимость от знания величины потерь мощности в оптическом тракте [1]. В частности, решение задачи оценки квантовой эффективности детектора фотонов всегда было сопряжено с тщательным измерением пропускания каждого элемента установки. Это обстоятельство дает самый значительный вклад в погрешность итоговых результатов, а также усложняет процедуру подсчета в целом. В связи с этим становится актуальным поиск методики измерения квантовой эффективности детектора, который оказался бы независим от дополнительных измерений затухания сигнала в компонентах оптической системы. В нашей работе мы предлагаем такую методику, в ее основе лежит эффект Хонга–У–Манделя [2], который посредством интерференции интенсивностей позволяет экспериментатору изменять число коррелированных пар, падающих на детекторы. Мы используем созданную нами для экспериментов по фотометрии установку [3] (рис. 1), описание которой в рамках полуклассической модели Клышко приводит к системе уравнений для показаний детекторов фотонов.

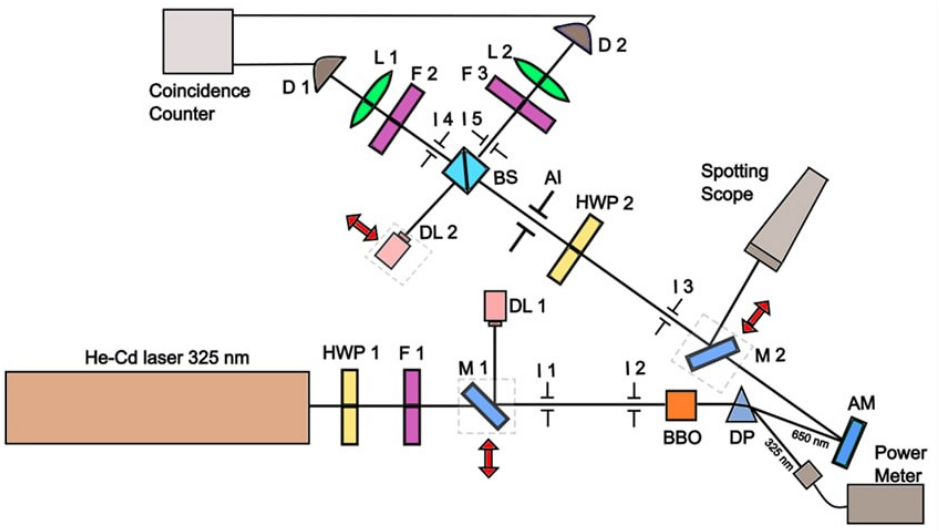


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

Луч накачки He–Cd лазера с длиной волны 325 nm падает на нелинейный кристалл BBO, что при выполнении условий фазового синхронизма ведет к генерации пар запутанных фотонов с взаимно ортогональными поляризациями и увеличенной вдвое длиной волны (синхронизм II типа). Далее они направляются на поляризационный светоделитель, где с равными вероятностями попадают на детекторы D1 и D2: назовем их триггерным и калибровочным соответственно. Существенной оказывается способность PNR (Photon Resolving Number) детектора в триггерном канале различать одно- и двухфотонные события (N_{t1ph} и N_{t2ph}) [4]. В этом случае удается избавиться от шума в калибровочном канале. Тогда запишем систему уравнений для показаний детекторов и схемы совпадений:

$$\begin{cases} N_{t1ph}=\eta_{t1ph}\frac{1}{2}K+\eta_{t1ph}\frac{1}{2}N; \\ N_{t2ph}=\eta_{t2ph}\frac{1}{4}N; \\ N_{cal}=\eta_{cal}\frac{1}{2}K+(2\eta_{cal}-\eta_{cal}^2)\frac{1}{4}N+\eta_{cal}\frac{1}{2}N; \\ N_c=\eta_{cal}\eta_{t1ph}N, \end{cases} \quad (1)$$

где η_{t1ph} и η_{t2ph} — квантовые эффективности PNR детектора одно- и двухфотонных событий, η_{cal} — квантовая эффективность детектора в калибровочном канале, K — количество одиночных шумовых фотонов, N — количество коррелированных пар фотонов, N_{cal} — одиночные счеты детектора в калибровочном канале. При записи этих уравнений мы предполагали, что светоделитель делит излучение строго в пропорции 50/50. Далее при доведении относительной фазы коррелированных фотонов должен наблюдаться эффект Хонга–У–Манделя: пары больше не разделяются на делителе. Все связанные фотоны теперь падают на детекторы парами. Это ведет к уменьшению одиночных счетов и провалу в совпадениях, что отражается на выражениях для счетов:

$$\begin{cases} \mathrm{N}_{\mathrm{t1ph}}^{\mathrm{M}}=\eta_{\mathrm{t1ph}}\frac{1}{2}\mathrm{K}; \\ \mathrm{N}_{\mathrm{t2ph}}^{\mathrm{M}}=\eta_{\mathrm{t2ph}}\frac{1}{2}\mathrm{N}; \\ \mathrm{N}_{\mathrm{cal}}^{\mathrm{M}}=\eta_{\mathrm{cal}}\frac{1}{2}\mathrm{K}+\left(2\eta_{\mathrm{cal}}-\eta_{cal}^{2}\right)\frac{1}{2}\mathrm{N}+\eta_{\mathrm{cal}}\frac{1}{2}\mathrm{N}; \\ \mathrm{N}_{\mathrm{c}}^{\mathrm{M}}=0, \end{cases} \tag{2}$$

где верхний индекс M указывает на то, что измерения ведутся в режиме провала Манделя. Тогда, вычитая уравнения системы (1) из уравнений системы (2) мы можем получить выражения для квантовой эффективности детектора в калибровочном канале:

$$\eta_{cal}=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{N_c}}{\mathrm{N_{t1ph}}-\mathrm{N_{t1ph}^{M}}}. \tag{3}$$

Этот результат позволяет избавиться от слагаемых, содержащих трудно измеряемые величины N и K. В отсутствие PNR детектора измерить конкретное значение квантовой эффективности не удается. Однако таким же образом можно получить отношение квантовых эффективностей задействованных детекторов:

$$\frac{\eta_{cal}}{\eta_t}=4\frac{(N_{cal}-N_{cal}^{M})}{N_c}. \tag{4}$$

Литература

1. *Клышко Д. Н., Пенин А. Н.* Перспективы квантовой фотометрии // УФН. 1987. Т. 152. С. 653–665.
2. *Hong C. K., Ou Z. Y., Mandel L.* Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference // Phys. Rev. Lett., 1987. V.59. P. 2044–2046.
3. *Tsovianov S. Y.* [et al.]. New scheme of absolute standardless quantum photometry // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ. 2021. С. 379–380.
4. *Di Giuseppe G.* [et al.]. Direct observation of photon pairs at a single output port of a beam-splitter interferometer // Phys. Rev. A. 2003. V. 68: 063817.

УДК 530.145

Вариационный алгоритм подготовки состояний на зашумленных ионных квантовых вычислителях

***З. И. Саяпин*[1,2], *Д. С. Рабинович*[1,2], *Ш. Адхикари*[2]**

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

В ионных квантовых вычислителях ионы некоторого вещества удерживаются в определенной конфигурации в электромагнитной ловушке Пауля [1, 2]. Обычно ионы располагаются в одномерной решетке, называемой ионной цепочкой, что мы предполагаем далее в нашей работе. Выбранная пара электронных уровней каждого иона используются для кодирования кубита, состояние которого контролируется электромагнитными лазерными импульсами.

При низких температурах движение ионов в ловушке квантуется в определенных модах, называемых двигательными модами. Эти моды определяются кулоновским взаимодействием ионов между собой и их взаимодействием с ловушкой. Возбуждение этих мод соответствует коллективному движению всех ионов в цепочке, и это используется для реализации запутывающих вентилей между произвольными кубитами. К таким вентилям относится вентиль Молмера–Соренсена [3, 4].

По мере увеличения размеров цепочек ионов становится все труднее распутывать электронные и двигательные степени свободы к концу времени выполнения запутывающего вентиля, что приводит к

потенциальной остаточной запутанности и снижению точности вентиля. Наличие таких неидеальностей характерно для современных шумных квантовых устройств промежуточного масштаба (NISQ) и представляет собой проблему для успешной реализации квантовых алгоритмов [5].

В данной работе мы рассмотрели шумные ионные квантовые вычислители, где ведущим источником ошибок является остаточная запутанность между электронными уровнями (уровнями, кодирующими кубиты) и двигательными уровнями (уровнями, описывающие движение ионов в цепочке), которая создается неидеальными вентилями Молмера-Соренсена. Мы разработали вариационный алгоритм подготовки квантовых состояний, который учитывает эту остаточную запутанность и при этом может успешно подготовить заданное чистое состояние с высокой точностью. Мы численно протестировали этот алгоритм подготовки состояний на 3, 4 и 5 кубитах, достигнув точности (fidelity) до 0,99.

Контролируемая подготовка произвольных не только чистых, но и смешанных состояний является также фундаментальной задачей [6]. Существует два основных подхода к ее решению. Первый подход, основывается на нахождении чистого состояния в пространстве большей размерности такого, что, вычисляя частичный след по добавленной подсистеме, в исходной подсистеме кубитов остается записано целевое смешанное состояние. Данный подход имеет существенный недостаток в том, что в худшем случае он требует для своей реализации удвоения числа кубитов в регистре. Второй подход связан представлением смешанного состояния в виде статистического ансамбля чистых состояний и последующей подготовкой чистых состояний из этого ансамбля в соответствии с их распределением вероятностей. Недостатком данного подхода является необходимость подготовки потенциально экспоненциально большого множества различных состояний.

Мы предлагаем решение по оптимизации аппаратных требований для подготовки смешанных состояний на ионных квантовых вычислителях, используя специфичные для данной платформы двигательные моды в качестве полезного вычислительного ресурса. Мы демонстрируем возможность подготовки смешанных состояний в регистре без использования дополнительных ионных кубитов, используя запутанность между электронной и двигательной подсистемами. В численных экспериментах для 2 кубитов были подготовлены смешанные состояния, которые отличались от целевых смешанных состояний по расстоянию Гильберта–Шмидта не более чем на 0,01.

Литература

1. *Pogorelov I.* [et al.]. Compact ion-trap quantum computing demonstrator // PRX Quantum. 2021. V. 2(2): 020343. DOI: 10.1103/PRXQuantum.2.020343.
2. *Schindler P.* [et al.]. A quantum information processor with trapped ions // New J. Phys. 2013. V. 15(12): 123012. DOI: 10.1088/1367-2630/15/12/123012.
3. *Sørensen A., Mølmer K.* Quantum computation with ions in thermal motion // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82(9) P. 1971–1974.
4. *Sørensen A., Mølmer K.* Entanglement and quantum computation with ions in thermal motion // Phys. Rev. A. 2000. V. 62(2): 022311. DOI: 10.1103/PhysRevA.62.022311.
5. *Preskill J.* Quantum computing in the NISQ era and beyond // Quantum. 2018. V. 2: 79. DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79.
6. *Ezzell N.* [et al.]. Quantum mixed state compiling // Quantum Sci. Technol. 2023. V. 8(3): 035001. DOI: 10.1088/2058-9565/acc4e3.

УДК 530.145, 517.97, 514.172

Кинематические ландшафты в задачах управления открытыми квантовыми системами

И. Т. Русских

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Исследование математических вопросов управления квантовыми системами имеет большое значение для развития современных квантовых технологий [1]. Задачу квантового управления часто можно сформулировать как задачу максимизации или минимизации целевого функционала, зависящего от управления. Примерами функционалов, которые возникают в теории квантового управления, являются функционалы максимизации среднего значения наблюдаемой и генерации квантового вентилях [2–4].

На практике для решения задач квантового управления обычно применяются алгоритмы локального поиска. Качество их работы сильно зависит от наличия локальных оптимумов, не являющихся гло-

бальными (так называемых ловушек) [2, 3]. Поэтому анализ наличия или отсутствия ловушек представляет собой важную задачу. Для полного проведения этого анализа необходимо исследовать динамический ландшафт, то есть проанализировать зависимость целевого функционала (динамического функционала) от управления. Динамический функционал представляется в виде композиции кинематического функционала, определенного на множестве возможных эволюций системы, и собственно отображения эволюции [2, 4, 5]. Поэтому свойства динамического ландшафта зависят от свойств кинематического ландшафта, то есть графика кинематического функционала.

Динамика замкнутой квантовой системы описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом, зависящим от управления. Поэтому оператор эволюции такой системы унитарен, и кинематический функционал определен на соответствующей группе Ли — специальной унитарной группе SU(n). Известно, что для таких функционалов кинематические ловушки (точки локального, но не глобального экстремума кинематического функционала) отсутствуют [2]. Динамика же открытой квантовой системы описывается уравнением ГКСЛ (Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада). В этом случае из-за диссипации эволюция системы является квантовым каналом, то есть вполне положительным отображением, сохраняющим след [6]. Соответственно, кинематический функционал определен на множестве квантовых каналов. В настоящей работе исследуются кинематические ландшафты в задачах управления открытыми квантовыми системами.

Одной из возможных параметризаций множества квантовых каналов является параметризация с помощью многообразия Штифеля, получаемая из разложения Крауса [7]. Такая параметризация использовалась для исследования кинематических ландшафтов [8, 9]. Другой параметризацией множества квантовых каналов является параметризация с помощью матриц Чои [7]. Такая параметризация не является гладкой, однако она позволяет использовать для исследования кинематического ландшафта методы выпуклого анализа. В настоящей работе эта параметризация используется для изучения функционалов максимизации среднего значения квантовой наблюдаемой и двух типов функционалов, описывающих генерацию квантового вентиля: функционал, определенный как квадрат нормы Фробениуса, и функционал, определенный с помощью действия квантового канала на трех специальных состояниях [10]. Для этих функционалов с помощью методов выпуклого анализа доказывается отсутствие кинематических ловушек для N-уровневой квантовой системы в случае произвольного N. Ранее отсутствие кинематических ловушек было доказано только для однокубитных каналов для задачи максимизации среднего значения квантовой наблюдаемой с помощью параметризации множества квантовых каналов точками многообразия Штифеля [8].

Литература

1. *Koch C. P.* [et al.] Quantum optimal control in quantum technologies. Strategic report on current status, visions and goals for research in Europe // EPJ Quantum Technol. 2022. V. 9: 19.
2. *Rabitz H. A.* [et al.] Quantum optimally controlled transition landscapes // Science. 2004. V. 303(5666). P. 1998–2001.
3. *De Fouquieres P., Schirmer S. G*. A closer look at quantum control landscapes and their implication for control optimization // Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top. 2013. V. 16(3): 1350021.
4. *Pechen A., Il'in N.* Trap-free manipulation in the Landau-Zener system // Phys. Rev. A. 2012. V. 86(5): 052117.
5. *Pechen A., Tannor D. J.* Are there traps in quantum control landscapes? // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106(12): 120402.
6. *Kraus K.* States, Effects, and Operations. — Berlin: Springer-Verlag, 1983.
7. *Choi M.* Completely positive linear maps on complex matrices // Linear Algebra and its Applications. 1975. V. 10(3). P. 285–290.
8. *Pechen A.* [et al.] Control landscapes for two-level open quantum systems J. Phys. A: Math. Theor. 2008. V. 41(4): 045205.
9. *Oza A.* [et al.] Optimization search effort over the control landscapes for open quantum systems with Kraus-map evolution // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. V. 42(20): 205305.
10. *Goerz M.* [et al.] Optimal control theory for a unitary operation under dissipative evolution // New J. Phys. 2014. V. 16: 055012.

Секция физики твердого тела

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

Зам. председателя: В. Н. Зверев (д. ф.-м. н.)

Секретарь: А. Ф. Шевчун (к. ф.-м. н.)

Дата: 03.04.2024 Время: 10:00

УДК 537.9

Реализация элементов сверхпроводящих нейроморфных систем

***А. С. Ионин*[1,2], *Ф. А. Разоренов*[1,2], *С. В. Егоров*[1], *Л. Н. Карелина*[1], *Н. С. Шуравин*[1], *И. Е. Тарасова*[1,2], *В. В. Больгинов*[1]**

[1]Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Искусственные нейронные сети (ANN), в последнее время, все в большем объеме внедряются в различные сферы, как инструмент решения задач различного спектра. Так они оказались крайне эффективными для оптимизации логистических маршрутов, решений в сфере распознавания изображений и в иных сферах, подразумевающих работы со множеством динамических параметров. Ключевым элементом искусственных нейроморфных систем является нейрон, выполняющий функцию нормировки сигнала. При этом для выполнения данной задачи подходят различные функции, однако наибольшей перспективностью и преобладающим использованием обладают две: нормировочная функция, имеющая форму сигмоиды (σ-нейрон), и распределение Гаусса (γ-нейрон). Увеличение объема массива данных, увеличение свободных параметров приводит к росту времени и росту затрачиваемых ресурсов при обучении сети, что в свою очередь подталкивает на изыскание новых вариантов реализации таких систем. Одним из таковых является идея реализации элементов нейроморфных систем на основе эффекта Джозефсона, наблюдающегося в сверхпроводящих системах. Сверхпроводящие интерферометры показывают большие, чем полупроводниковые структуры, частоты реализации нормирующих функций, а также могут быть реализованы в концепции адиабатических вычислений, что в свою очередь позволит на порядки сократить энергопотребление [1, 2].

В данной работе представлены результаты реализации двух типов нейронов [5, 6], предложенных ранее в работах [3, 4]. Образцы являются многослойными тонкопленочными структурами, формирующие сверхпроводящие замкнутые контуры. Контура содержат один или два туннельных джозефсоновских контакта для σ- и γ-нейронов соответственно. Сформированные структуры спроектированы с учетом собственной и взаимной индуктивности, что позволяет получить передаточные функции заданного вида. Разработанная топология чипов предполагала изготовление контуров над сверхпроводящим экраном, который устранял влияние внешнего магнитного поля и локализовывал магнитный поток сигнальных линий. Выходной магнитный поток детектировался при помощи двухконтактного СКВИДа, изготовленного на одной подложке с нейроном и индуктивно связанного с ним. В ходе эксперимента были получены передаточные функции, близкие к необходимому виду.

Для анализа передаточной функции σ-нейрона были выведены алгебраические уравнения, описывающие взаимодействие образца с задающим и считывающим элементами. Было показано, что полученные формулы хорошо описывают форму передаточной функции, однако сверхпроводящий экран не обеспечивает полной независимости элементов нейрона, предполагавшейся в ранее предложенных подходах

Этот вывод подтверждается результатами экспериментального исследования двухконтактного γ-нейрона, поскольку его передаточная функция содержит две компоненты: нелинейную куполообразную (полезный сигнал) и линейную, возникающую вследствие непосредственной передачи магнитного потока в измерительную цепь. Показано, что форма нелинейной компоненты удовлетворительно описывается

ранее предложенной моделью γ-нейрона, однако взаимодействие с измерительным СКВИДом приводит к появлению значительного потока смещения, влияющего на форму передаточной функции.

Литература

1. *Soloviev I. I.* [et al.]. Beyond Moore's technologies: operation principles of a superconductor alternative // Beilstein J. Nanotechnol. 2017. V. 8. P. 2689–2710.
2. *Bakurskiy S. V.* [et al.]. Progress in the Area of New Energy Efficient Basic Elements for Superconducting Electronics // Moscow University Physics Bulletin. 2014. V. 69(4). P. 275–286.
3. *Klenov N. V.* [et al.]. Energy Efficient Superconducting Neural Networks for High-speed Intellectual Data Processing Systems // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2018. V. 28(7). P. 1–6.
4. *Щеголев А. Е.* [и др.]. Адиабатические сверхпроводящие ячейки для энергоэффективных нейронных сетей // Журнал радиоэлектроники. 2016. Т. 9.
5. *Ионин А. С.* [и др.]. Экспериментальное исследование прототипа сверхпроводящего сигма-нейрона для адиабатических нейронных сетей // ЖЭТФ. 2023. Т. 164. № 6. С. 1008–1021.
6. *Ионин А. С.* [и др.]. Экспериментальное исследование передаточной функции прототипа сверхпроводящего гаусс-нейрона // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. № 10. С. 761–768.

УДК 538.915

Плазменные возбуждения в двумерной электронной системе с боковой экранировкой

***А. М. Зарезин*[1,2], *В. М. Муравьев*[1], *П. А. Гусихин*[1], *И. В. Кукушкин*[1]**

[1]Институт физики твердого тела РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Интерес к исследованию плазменных возбуждений в двумерных электронных системах (ДЭС) связан с рядом уникальных свойств, проявляемых плазменными возбуждениями в системах пониженной размерности. Электромагнитный отклик электронных систем пониженной размерности выгодно отличается от трехмерного случая наличием сильной дисперсионной зависимости и возможностью изменения свойств таких возбуждений в широком диапазоне. В квазистатическом пределе дисперсионный закон двумерных плазмонов имеет бесщелевой вид [1]:

$$\omega_p(q) = \sqrt{\frac{n_s e^2}{2\varepsilon\varepsilon_0 m^*} q}, \quad (1)$$

где q — волновой вектор плазмона, n_s — концентрация двумерных электронов, e — заряд электрона, ε и ε_0 — диэлектрическая проницаемость окружения ДЭС и диэлектрическая постоянная соответственно, m^* — эффективная масса электронов. Резонансную частоту двумерных плазменных возбуждений можно изменять, меняя концентрацию электронов, прикладывая магнитное поле или модифицируя диэлектрическое/металлическое окружение ДЭС.

В частности, нанесение металлического затвора, частично или полностью покрывающего ДЭС, широко используется как в практической, так и в научной области. При полной экранировке ДЭС близким металлическим затвором спектр двумерных плазмонов в такой системе существенным образом модифицируется и становится линейным [2]. Однако при такой конфигурации металлический затвор экранирует падающее электромагнитное излучение и затрудняет доступ к ДЭС. Существует альтернативный способ, позволяющий модифицировать свойства плазмонов в ДЭС с помощью близко расположенного металлического электрода, при этом не закрывая ДЭС — нанесение латерального (бокового) металлического затвора.

В настоящей работе представлены результаты исследования плазменных возбуждений в ДЭС в форме дисков диаметром d, равным 250 мкм и 500 мкм, и с боковым металлическим затвором, расположенным таким образом, что между краем ДЭС и краем затвора были щели размерами h от 0.2 до 40 мкм. Схематический вид образцов показан на рис. 1a сверху. Эксперименты проводились на GaAs/AlGaAs гетероструктурах. Типичная концентрация электронов в ДЭС составляла $2 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$. Плазменные резонансы детектировались с помощью бесконтактной неинвазивной оптической методики, основанной на высокой чувствительности спектра люминесценции двумерного электронного газа к резонансному разогреву ДЭС. Измерения проводились при гелиевых температурах в криостате со сверхпроводящим соленоидом.

Плазменные возбуждения в исследуемой системе демонстрировали типичное поведение с разделением на верхнюю «объемную» и нижнюю краевую магнитоплазменные ветви при любых размерах щели

(рис. 1*b*, сплошные точки). При уменьшении размера щели между ДЭС и боковым затвором происходило заметное уменьшение резонансной частоты двумерного плазмона в нулевом магнитном поле. Оказалось, что экспериментально полученные значения резонансной частоты в нулевом магнитном поле (рис. 1*c*, сплошные точки) ложатся на универсальную кривую в координатах частоты, нормированной на частоту неэкранированного плазмона в диске, и щели между ДЭС и боковым затвором, нормированной на диаметр диска [3]. Было проведено аналитическое рассмотрение, учитывающее влияние электрической емкости между боковым затвором и ДЭС. Полученная аналитически зависимость для нормированной резонансной частоты в нулевом магнитном поле оказалась зависящей только от произведения волнового вектора плазмона на размер щели и качественно воспроизвела экспериментальные данные [3]. Также было проведено численное моделирование плазменных возбуждений в рассматриваемой системе. Была получена кривая (рис. 1*c*, сплошная кривая), хорошо согласующаяся с результатами эксперимента [3].

Также было обнаружено, что при размерах щели меньше 2 мкм наблюдается заметное отклонение экспериментальных данных от универсальной кривой (рис. 1*d*). Данный эффект был объяснен наличием краевой области обеднения ДЭС (рис. 1(а), снизу). То есть при размерах щели между ДЭС и боковым затвором меньше 1 мкм появляется другой характерный масштаб — размер области краевого обеднения, что приводит к насыщению зависимости резонансной частоты от размера щели (рис. 1*d*, вставка) [3]. Таким образом, боковой металлический затвор можно использовать не только для изменения резонансной частоты плазмона, не перекрывая при этом ДЭС, но и для спектроскопии области краевого обеднения ДЭС.

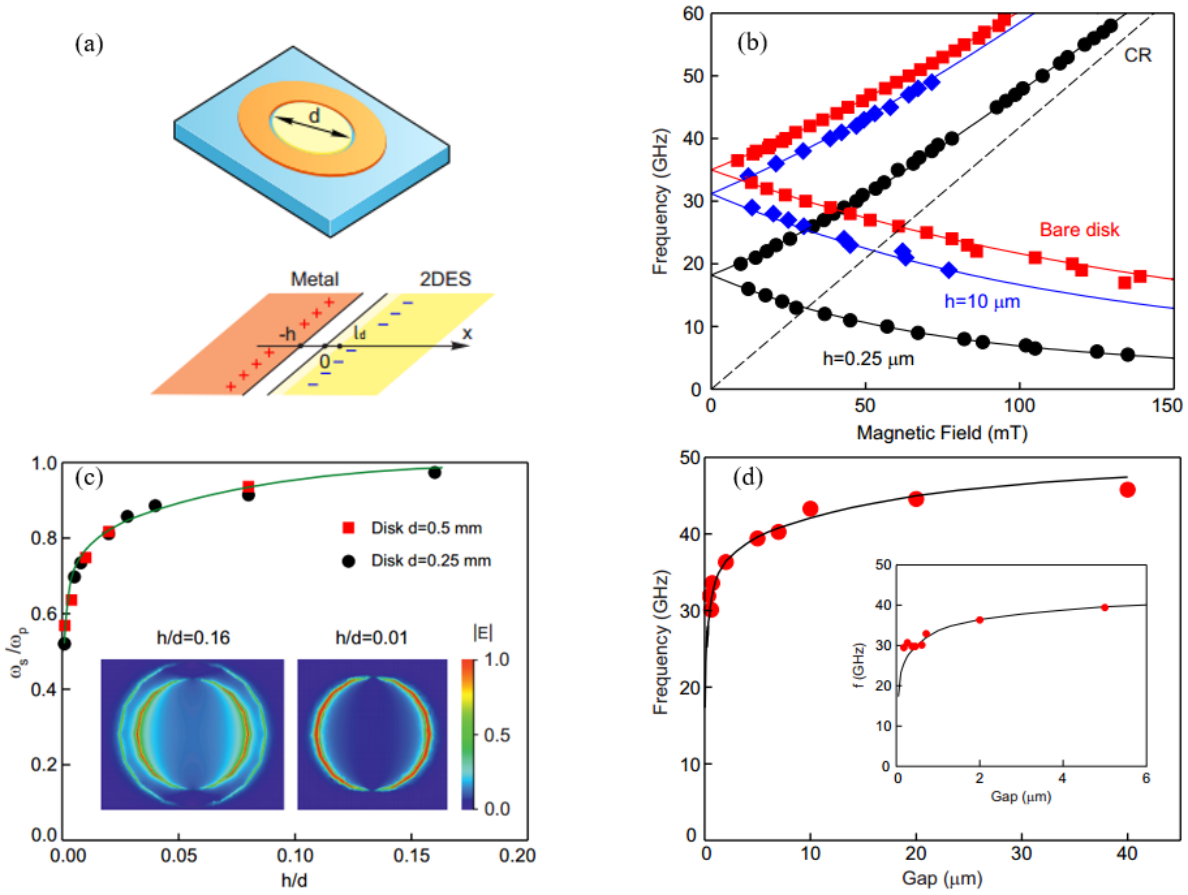


Рис. 1. Вверху — схематический вид образца, внизу — качественная картина распределения зарядов вблизи края ДЭС (*a*). Магнитодисперсионные зависимости для ДЭС в форме диска диаметром 250 мкм с различной степенью боковой экранировки. Точками показаны экспериментальные данные (*b*). Зависимость резонансной частоты в нулевом магнитном поле, нормированной на частоту неэкранированного плазмона, от размера щели, нормированного на диаметр диска. Сплошные точки — эксперимент, кривая получена при численном моделировании. На вставках — результаты численного моделирования (*c*). Зависимость резонансной частоты в нулевом магнитном поле от размера щели. Сплошные точки — эксперимент, кривая получена при численном моделировании. На вставке — фрагмент графика в увеличенном масштабе с размерами щелей от 0.2 до 5 мкм (*d*). Из статьи [3]

Литература

1. *Stern F.* Polarizability of a two-dimensional electron gas // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18. P. 546–548.

2. *Chaplik A. V*. Possible Crystallization of Charge Carriers in Low-density Inversion Layers // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1972. V. 62. P. 395–398.
3. *Zarezin A. M.* [et al.]. Study of Laterally Screened Two-Dimensional Plasma Excitations // Phys. Rev. B. 2023. V. 108: 115419.

УДК 538.911/915

Структурные и оптические свойства InAs/GaSb сверхрешетки с краем фундаментального поглощения в дальнем ИК-диапазоне

***А. Р. Дубовая*[1,2], *В. С. Кривобок*[1,3], *И. И. Минаев*[2], *Г. Н. Ерошенко*[2], *А. В. Клековкин*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[3]АО «НПО «Орион»

На сегодняшний день фотодетекторы на основе сверхрешеток второго типа (type-II superlattice T2SL), предназначенные для работы в MWIR и LWIR диапазонах, являются основными конкурентами для систем на основе твердых растворов кадмий-ртуть-теллур (HgCdTe), а также фотодетекторов на полупроводниковых квантовых ямах [1]. Общераспространенной парой материалов для реализации T2SL систем является InAs и GaSb. Оба этих полупроводниковых материала принадлежат семейству 6,1Å. Сверхрешетки InAs/GaSb обладают целым рядом преимуществ, по сравнению с фотодетекторами на полупроводниковых квантовых ямах и HgCdTe, а именно возможностью подавления Оже-рекомбинации и межзонного туннелирования [2].

В данной работе осуществлен рост 4.5нм /2.5 нм InAs/GaSb сверхрешетки, общей толщиной 700 нм, а также произведен анализ полученной гетероструктуры с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ), рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии. Рост образца был осуществлен на установке молекулярно-лучевой эпитаксии Compact-21T (RIBER), оснащенной двузонными эффузионными источниками материалов III группы (Al, Ga, In), и вентильными источниками с зоной крекинга для элементов V группы (As, Sb), а также системой дифракции быстрых электронов на отражение (RHEED). Представленная в данной работе структура была выращена на нелегированной *epi-ready* подложке GaSb (100).

На рис. 1*а* приведена морфология поверхности выращенной гетероструктуры полученная с помощью АСМ. Данная поверхность характеризуется среднеквадратичной шероховатостью RMS = 0.26 нм. Следовательно, на фоне суммарной толщины структуры, при формировании отдельного слоя, не имеется существенного вклада в дефектообразование на поверхности выращенного материала.

Основные структурные характеристики сверхрешетки, включая толщины слоев и качество интерфейсов, были исследованы с помощью рентгеноструктурного анализа. На рис.1б показана экспериментальная кривая качания и наложенная на нее расчетная кривая дифракционного отражения. Из рентгеноструктурного анализа следует, что толщины слоев InAs и GaSb составляют 4,98 нм и 2,49 нм соответственно и согласуются в пределах погрешности с номинальными ростовыми параметрами. Просвечивающая электронная микроскопия (ТЕМ), изображенная на рис.1в, позволила подтвердить толщины слоев выращенной структуры и убедится в отсутствии видимых дефектов в близи границ гетеропереходов. Так, для InAs d_1=4,54 нм, а для GaSb d_2=2,43 нм.

На рис. 2 приведен спектр отражения выращенной гетероструктуры, записанный при температуре 77К. В низкочастотной части спектра регистрируется выраженный резонанс, возникающий за счет взаимодействия оптических фононов сверхрешетки с электромагнитным излучением. В диапазоне 2000-8000 $см^{-1}$ регистрируются осцилляции, вызванные интерференционными эффектами на толщине сверхрешетки. Резонансная особенность в районе 1150 $см^{-1}$ не может быть отнесена к фононным резонансам, так как фононный спектр в InAs/GaSb ограничен частотами порядка 250 $см^{-1}$. Также, она не может быть приписана интерференционным осцилляциям на толщине сверхрешетки, так как в этом случае необходимо высокое значение показателя преломления, которое примерно в двое превышает типичные значения для InAs и GaSb (в диапазоне длин волн 5-20 мкм). Таким образом, обсуждаемая особенность определяется электронным резонансом сверхрешетки. Моделирование электронного спектра сверхрешетки в рамках метода огибающей волновой функции и, затем, расчеты частотной зависимости коэффициента отражения, позволяют отождествить особенность в районе 1150 $см^{-1}$ (142.5 мэВ) с переходом между мини-

зонами. При этом основное состояния определяется верхней (заполненной) минизоной тяжелых дырок, возбужденное состояние – первой (незаполненной) минизоной электронов.

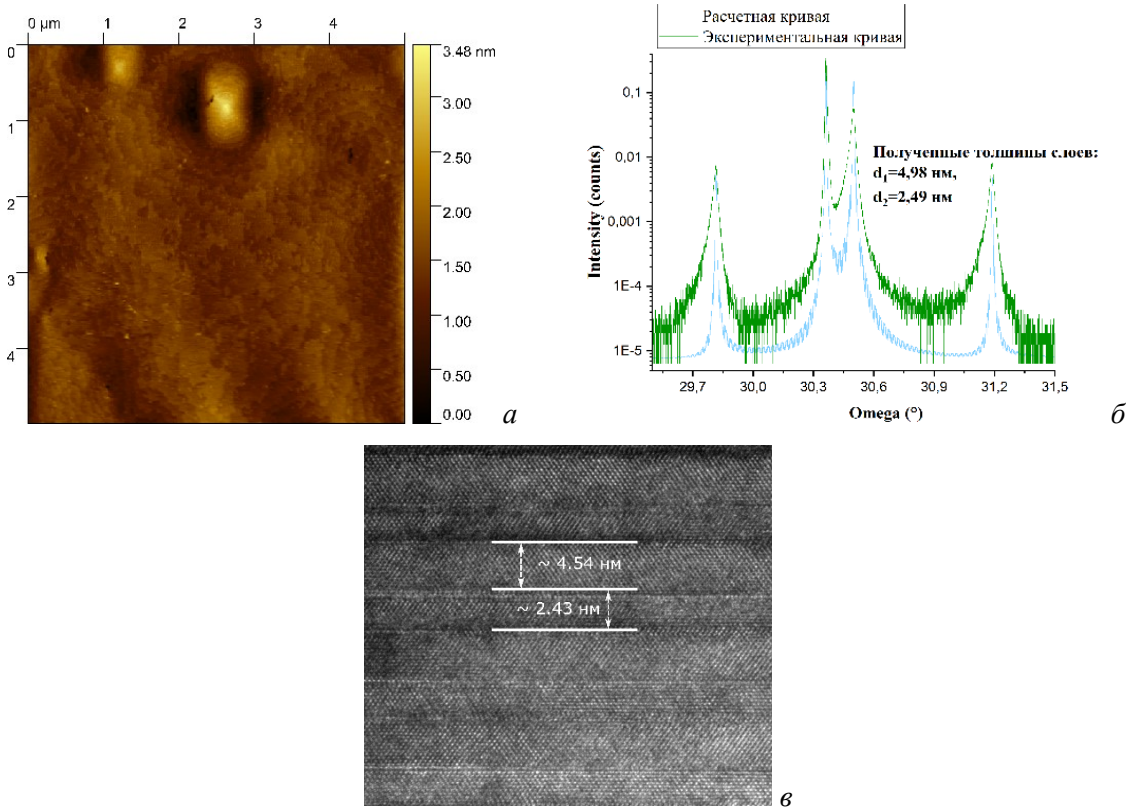


Рис. 1. АСМ-изображение поверхности гетероструктуры InAs/GaSb (*а*); кривые дифракционного отражения для образца со сверхрешеткой InAs/GaSb 100 периодов с экспериментальной (зеленой) и совмещенной с ней расчетной кривой (голубой) (*б*) и ТЕМ-изображение (*в*)

Таким образом, получена короткопериодная сверхрешетка, состоящая из слоев InAs толщиной 4.5 нм и слоев GaSb толщиной 2.5 нм. Высокое структурное совершенство сверхрешетки подтверждено просвечивающей электронной микроскопией, атомно-силовой микроскопией и аппроксимацией рентгеновских кривых качания. Показано, что ширина запрещенной зоны сверхрешетки, сформированной верхней минизоной тяжелых дырок и нижней электронной минизоной, составляет 142.5±10 мэВ при температуре 77К.

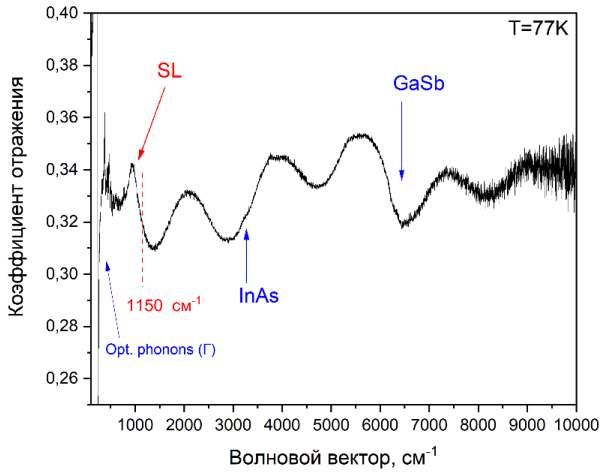


Рис.2. Спектр отражения сверхрешетки при температуре 77 К

Литература

1. *Rogalski A.* [et al.]. Third-generation infrared photodetector arrays // J. Appl. Phys. 2009. V. 105(9). P. 4.
2. *Satpati B.* [et al.]. Interface analysis of InAs/GaSb superlattice grown by MBE // J. Cryst. Growth. 2007. V. 301. P. 889–892.

УДК 538.915, 538.955

ЭПР-спектроскопия ферромагнитного перехода двумерной сильно коррелированной электронной системы в режиме квантового эффекта Холла

***Г. А. Николаев*[1,2], *А. Р. Хисамеева*[1], *С. А. Андреева*[1,3], *А. В. Щепетильников*[1], *И. В. Кукушкин*[1]**

[1]Институт физики твердого тела РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Высшая школа экономики (национальный исследовательский университет)

Изучение низкоразмерных электронных систем является плодотворной областью исследований в физике твердого тела. У нее богатая история, начавшаяся с середины прошлого века и продолжающаяся новыми интеллектуальными вызовами по сей день. Непроходящая актуальность темы во многом обусловлена тесной связью с развитием технологии изготовления структур, быстрым ростом количества материальных систем и новыми задачами спиновой электроники, которая требует фундаментальных исследований для полноценного понимания процессов и механизмов, лежащих в ее основе.

В работе изучается двумерная электронная система гетероперехода ZnO/MgZnO. Она выделяется на фоне множества альтернативных полупроводниковых систем по нескольким причинам. Во-первых, ZnO — прямозонный однодолинный полупроводник с широкой запрещенной зоной, причем квантовая яма ZnO/MgZnO не предполагает допирования. Также, в этой системе мала константа обменного взаимодействия, что в совокупности с большим g-фактором упрощает анализ экспериментальных результатов спинового упорядочения. Во-вторых, большая эффективная масса и малая диэлектрическая проницаемость относительно GaAs. Это приводит к тому, что кулоновская энергия в несколько раз превышает энергию Ферми, так что наблюдаются новые эффекты физики сильно коррелированных электронных систем.

Лишь в последние десятилетия появились структуры ZnO/MgZnO достаточно высокого качества для изучения квантового эффекта Холла. К настоящему моменту были проведены многочисленные транспортные и оптические эксперименты, в результате чего были подробно изучены дробный Квантовый эффект Холла, перенормировка параметров из-за сильного межэлектронного взаимодействия, ферромагнитный переход в виде пика магнетосопротивления, а также различные виды возбуждений и связанные с ними эффекты.

Основные методика нашей работы — ЭПР-спектроскопия. Она доказала свою эффективность в изучении магнитного порядка основного состояния системы, поскольку возбуждение спинового резонанса основано на несбалансированной спиновой заселенности электронной системы. Эксперимент был проведен в криостате 3He при температуре 0.5 K и в однородном магнитном поле до 15 T. Спиновый резонанс индуцировался субтерагерцевым излучением и наблюдался в виде пика сопротивления при изменении магнитного поля [1]. Чтобы улучшить соотношение сигнал-шум, ЭПР детектировался методикой двойного синхронного усиления. Изучался образец ZnO/MgZnO с омическими индиевыми контактами в стандартной геометрии ван дер Пау. Ранее, уже изучался ферромагнитный переход в режиме квантового эффекта Холла на факторе заполнения $\nu = 2$ [2]. Фазовый переход индуцировался изменением угла наклона Θ двумерной электронной системы относительно направления магнитном поля. Угол Θ модулирует отношение энергии Зеемана и циклотронной энергии, так что при разных углах спиновое упорядочение разное. В работе [2] это приводило к значительному изменению амплитуды ЭПР в разных магнитных фазах, а также к уширению и расщеплению ЭПР на несколько пиков в непосредственной близости от пика магнетосопротивления при критическом угле.

В отличие от простого случая одноэлектронной модели, в номинально немагнитной фазе на четных факторах заполнения также наблюдается спиновый резонанс, причем с аномальным поведением — пик ЭПР направлен по уменьшению сопротивления. Эффект возникновения аномального ЭПР подробно изучался в [3], а попытка объяснить механизм его появления была сделана в [4]. Предполагается, что аномальный ЭПР — это эффект сильного электрон-электронного взаимодействия, а наблюдением нормального или же аномального спинового резонанса можно сделать вывод про магнитный порядок фактора заполнения $\nu = 2$ КЭХ.

Наша работа посвящена уточнению результатов на четных факторах заполнения и изучению ферромагнитного перехода основного состояния на нечетных факторах заполнения. На рис. 1 представлен основной результат — эволюция пиков ЭПР при изменении Θ на факторе $\nu=3$. Меняя частоту излучения и подстраивая магнитное поле, последовательно детектируется ЭПР и проходится весь фактор заполнения КЭХ. Разными цветами обозначены пики, возбуждаемые на разных резонансных частотах. Черная сплошная кривая соответствует продольному магнетосопротивлению, а именно участку вблизи фактора $\nu = 3$

КЭХ. Как и в работе [2], наблюдается увеличение амплитуды ЭПР при переходе из магнитной фазы при $\Theta < \Theta_C$ (рис. 1*c*) в магнитную фазу при $\Theta > \Theta_C$ (рис. 1*a*). Однако в отличие от фактора заполнения $\nu = 2$, где увеличение угла приводит к переходу системы из парамагнитного в ферромагнитное состояние, вблизи заполнения $\nu=3$ переход происходит между двумя ферромагнитными фазами с разной степенью спиновой поляризации. Вблизи пика магнетосопротивления, ассоциированного с ферромагнитным переходом на критическом угле $\Theta = \Theta_C$, пики ЭПР уширяются, а в области больших магнитных полей не наблюдаются вовсе (рис. 1*b*), что также свидетельствует об изменении спинового порядка основного состояния.

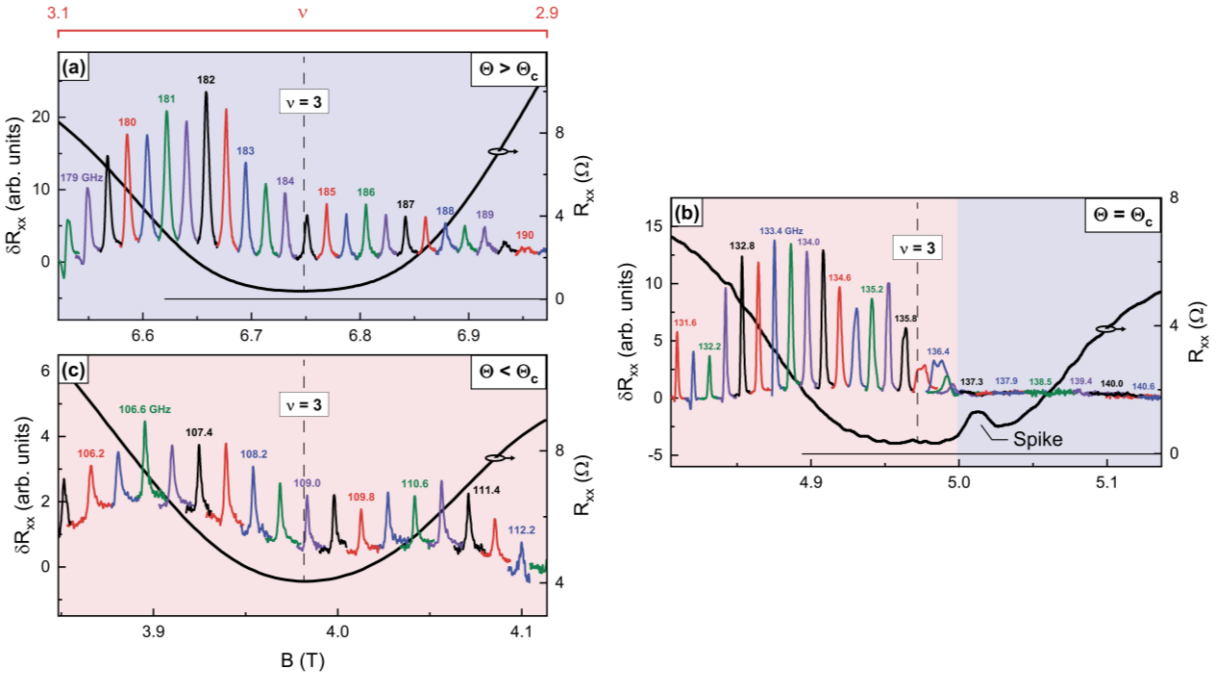


Рис. 5. Эволюция пиков ЭПР при изменении угла наклона Θ двумерной электронной системы в магнитном поле на факторе заполнения квантового эффекта Холла $\nu = 3$. Разными цветами обозначены пики, возбуждаемые на разных резонансных частотах. Черная сплошная кривая соответствует продольному магнетосопротивлению, а именно участку вблизи фактора $\nu = 3$ КЭХ; *a* и *c* — состояния с разным спиновым порядком, *b* соответствует критическому углу наклона, в котором проявляется ферромагнитный переход в виде пика магнетосопротивления (spike)

Литература

1. *Stein D., Klitzing K., Weimann G.* Electron Spin Resonance on GaAs−$Al_xGa_{1-x}As$ Heterostructures // Physical review letters. 1983. V. 51(2). P. 130–133.
2. *Shchepetilnikov A. V.* [et al.]. Electron Spin Resonance under Conditions of a Ferromagnetic Phase Transition // JETP Letters. 2021. V. 113(10). P. 657–661.
3. *Shchepetilnikov A. V.* [et al.]. Anomalous spin resonance around even fillings in the quantum Hall regime // Physical Review B. 2021. V. 104(7): 075437.
4. *Shchepetilnikov A. V.* [et al.]. Origin of the anomalous spin resonance in a strongly correlated electron system // Physical Review B. 2023. V. 107(19): 195415.

УДК 538.958

Спектроскопия отражения многослойных Ван-дер-Ваальсовых структур с монослоями дихалькогенидов переходных металлов

***Г. М. Голышков*[1,2], *А. В. Черненко*[2], *А. С. Бричкин*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт физики твердого тела РАН

Гетероструктуры на основе монослойных кристаллов дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), таких как MX_2 (M = Mo, W; X = S, Se, Te), привлекают значительное внимание благодаря уникальным свойствам, которые делают их перспективными объектами для применения в оптоэлектронных

устройствах, а также интересным предметом для фундаментальных исследований. Оптические свойства монослоев ДПМ определяются экситонами (коррелированными электронно-дырочными парами). Малая эффективная диэлектрическая проницаемость и большая эффективная масса экситона, приводит к тому, что энергия связи в подобных структурах составляет несколько сотен мэВ, что позволяет наблюдать экситонные эффекты в широком диапазоне температур вплоть до комнатной [1].

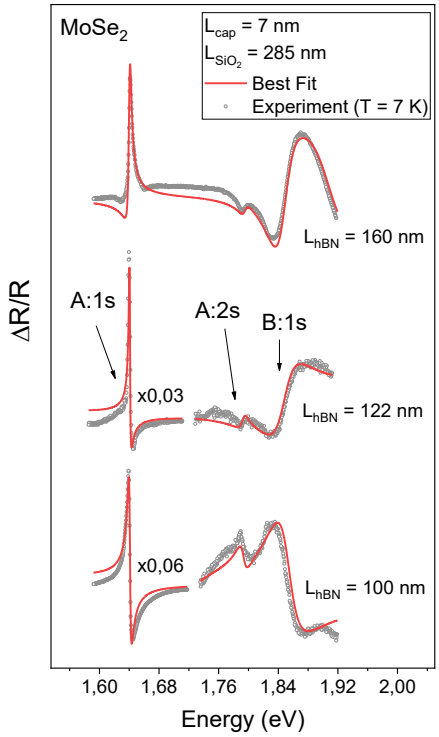


Рис. 1. Спектры контрастного отражения для структуры со ступенчатым слоем нижнего hBN для разных позиций на образце. Точками обозначены экспериментальные результаты при T = 7 K. Красная линия — численно смоделированный спектр. Толщины слоев hBN, используемые при моделировании, определены с помощью АСМ. Спектр основного экситонного состояния (A:1s) домножен на соответствующий коэффициент

Исследуемые гетероструктуры получены методом механической эксфолиации объемных кристаллов ДПМ и гексагонального нитрида бора (hBN) и представляют собой инкапсулированные hBN монослои $MoSe_2$ или WSe_2 на подложке SiO_2/Si или на подложке из кварца. Такие структуры оказываются устойчивыми к окружающей среде и термоциклированию. При энергиях выше основного экситонного состояния (A:1s) оптическое поглощение определяется возбужденными состояниями A-серии, а также серией B-экситонов, отделенных от A-экситонов за счет расщепления валентной зоны из-за спин-орбитального взаимодействия [1].

Линии экситонных резонансов, связанные с поглощением света возбужденными состояниями, хорошо разрешаются в спектрах отражения. Для структур как с монослоями $MoSe_2$, так и с монослоями WSe_2 наблюдается серия A-экситонов вплоть до A:3s, а также основное состояние B-экстона (B:1s). Кроме того, прослеживается значительная вариация формы экситонных резонансов в спектрах отражения для различных позиций на образце (рис. 1). Это вызвано тем, что спектр отражения от слоистой Ван-дер-Ваальсовой структуры формируется не только за счет самого монослоя ДПМ, но и за счет слоев hBN и подложки. С целью определения влияния параметров структуры на форму спектра отражения были проведены исследования образцов с однородными слоями hBN различной толщины, а также образцов со ступенчатым слоем нижнего hBN.

Анализ спектров отражения производится посредством численного моделирования с использованием коэффициента отражения слоистой структуры (метод матриц переноса) [2]. Наиболее точное совпадение экспериментальных данных с расчетными достигается при использовании значений толщин слоев hBN близких к значениям, определенным с помощью атомно-силового микроскопа. Это позволяет определить параметры структуры, при которых возбужденные экситонные состояния проявляются в спектре наиболее четко (см. рис. 1, где приведены спектры отражении при разных толщинах нижнего слоя hBN).

Для оценки энергии связи экситонов были проведены расчеты с численным решением уравнения Шредингера для s-состояний экситона с использованием потенциала электронно-дырочного взаимодей-

ствия в тонких пленках, учитывающего диэлектрическое экранирование [2]. Этот метод позволяет определить энергию связи экситона в $MoSe_2$ ~ 200 мэВ, в WSe_2 энергия связи ~ 164 мэВ и значения величины расщепления A:2s–A:1s и A:3s-A:2s. Полученные данные находятся в хорошем соответствии с экспериментальными результатами.

Численный метод, основанный на методе матриц переноса, позволяет достаточно точно определить зависимость формы экситонных резонансов в спектрах отражения от параметров структуры и подобрать оптимальные параметры для наблюдения возбужденных состояний. Анализ возбужденных состояний позволяет уточнить зонные параметры исследуемых инкапсулированных монослоев ДПМ, а также энергию связи экситонов. Наличие в спектре возбужденных состояний свидетельствует о высоком качестве исследуемых структур.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания ИФТТ РАН.

Литература

1. *Wang G.* [et al.]. Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides // Rev. Mod. Phys. 2018. V. 90(2):021001.
2. *Robert C.* [et al.]. Optical spectroscopy of excited exciton states in MoS_2 monolayers in van der Waals heterostructures // Phys. Rev. Mater. 2018. V.2(1):011001

УДК 548.54

Влияние концентрации активатора на спектрально-люминесцентные и сцинтилляционные характеристики кристаллов ИАГ:Ce

***Е. С. Салтанова*[1,2], *В. А. Федоров*[2]**

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

Иттрий-алюминиевые гранаты с активацией ионами Ce^{3+} (ИАГ:Ce) принадлежат к классу синтетических гранатов с общей формулой $Ln1_3Al_5O_{12}:Ln2^{3+}$ (где Ln1 = Y, Lu, Gd или их комбинация, а Ln2 = Ce, Pr,Yb и др., или их комбинация). Кристаллы ИАГ:Ce, выращиваемые, как правило, из высокотемпературных расплавов методом Чохральского, обладают структурными неоднородностями из-за роста различных граней на выпуклой поверхности границы фаз [1]. Альтернативный метод — горизонтальная направленная кристаллизация (ГНК), позволяющий получать крупные монокристаллы с меньшими структурными неоднородностями, характеризуется нарушением стехиометрии расплава в процессе кристаллизации [2]. Данная работа фокусируется на исследовании свойств кристаллов ИАГ:Ce, с целью оптимизации технологических условий выращивания методом ГНК, с акцентом на повышении их сцинтилляционных параметров. Кристаллы предназначены для сцинтилляционных экранов рентгеновских томографов высокого пространственного разрешения.

В случае кристаллов ИАГ:Ce, для которых коэффициент распределения церия при кристаллизации из расплава составляет примерно 0,1 [3], важными являются задачи достижения высокой концентрации и равномерного распределения ионов Ce^{3+} вдоль длины кристалла.

В работе были проанализированы люминесцентные и сцинтилляционные свойства кристаллов иттрий-алюминиевых гранатов, активированных ионами церия (ИАГ:Ce), полученных из расплавов методом ГНК в вакууме. Исследованы спектры поглощения, рентгенолюминесценции (РЛ), кинетика затухания РЛ и световыхода сцинтилляций в широком диапазоне концентраций активатора (от 0,036 ат.% до 1,175 ат.% замещения иттрия в с-позициях структуры граната). Обнаружено эффективное подавление собственной люминесценции кристаллической основы в ультрафиолетовой (УФ) области при увеличении концентрации активатора.

Определена оптимальная концентрация активатора, обеспечивающая максимально возможные значения интенсивности РЛ и световыхода сцинтилляций ионов Ce^{3+}, с учетом технологических особенностей метода горизонтальной направленной кристаллизации в вакууме оптически совершенных монокристаллов с высокой концентрацией ионов Ce^{3+}. Исследованы зависимости кинетики РЛ от концентрации активатора. Установлена возможность получения кристаллов с интенсивностью световыхода до 25000 фот/МэВ.

Исследования характеристик кристаллов частично выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования Курчатовского комплекса «Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова» НИЦ «Курчатовский институт», сотрудникам которого выражаем нашу благодарность.

Литература

1. *Петросян А. Г.* Исследование условий выращивания лазерных кристаллов $Lu_3Al_5O_{12}$ активированных ионами редкоземельных элементов // ФСЛК. 1986 / под ред. А. А. Каминского. — М.: Наука, 1986. С. 235.
2. *Багдасаров Х. С.* Высокотемпературная кристаллизация из расплава. — М.: Физматлит, 2004. С. 160.
3. *Zhaoa G.* [et al.]. Characteristics of large-sized Ce : YAG scintillation crystal grown by temperature gradient technique // J. Cryst. Growth. 2003. V. 253. P. 290–296.

УДК 539.233

Чувствительность проводящих свойств графена к высыхающим каплям

***И. А. Бетке*[1,2]**

[1]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
[2]Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН

Графен, обладающий уникальными характеристиками теплопроводности, химической и механической стабильности, очень перспективен в сенсорных приложениях, поскольку его свойства во многом определяются параметрами окружающей среды. В последних работах было показано, что графен изменяет свои проводящие свойства в том числе при погружении в водную среду [1]. На основе данного эффекта в настоящее время создаются манометры и датчики истечения, не изменяющие свойства исходных потоков. В данной работе исследуется наличие подобного эффекта в процессе высыхания водных капель на композитах, покрытых графеном.

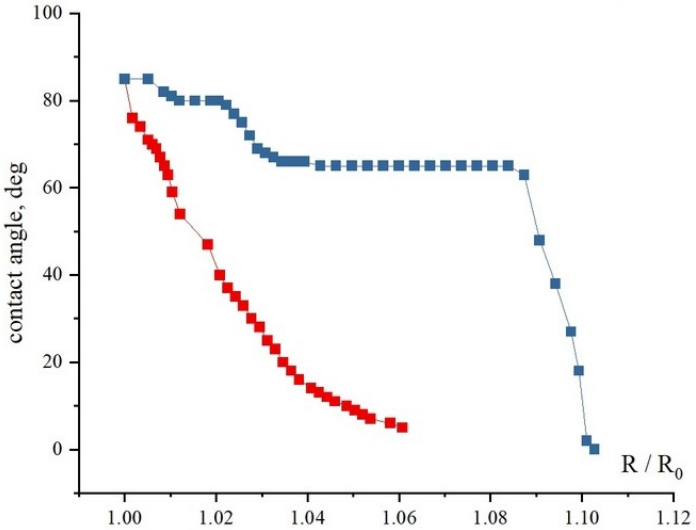


Рис. 1. Сопротивление графеновых чипов по мере высыхания капли на гладкой подложке SiO_2 (красный) и шероховатой (синий)

Цель работы — провести серию экспериментов, измерить скорость изменения контактного угла, площади контакта высыхающей капли с поверхностью и сопротивление графенового чипа на непроводящей подложке, а также установить основные взаимосвязи между этими величинами.

В экспериментах использовался графен, синтезированный на медной фольге методом парофазного осаждения при атмосферном давлении и перенесенный на подложки оксида кремния через водную среду. Ранее было показано, что данный метод одновременно обладает высокой воспроизводимостью и хорошим качеством переносимого графена [2].

В работе рассматриваются подложки оксида кремния с разными значениями шероховатости, на которых выявлены различные характеры высыхания капель. На более шероховатых образцах капля постепенно увеличивает радиус кривизны при неизменной площади контакта, что объясняется сильным

поверхностным взаимодействием. На гладких, напротив, капля равномерно сжимается при неизменном контактном угле. Связь между проводящими свойствами и контактным углом отражена на рис. 1.

Установлено, что для режима высыхания гладкой поверхности, зависимость проводимости образца от площади капли с высокой точностью линейна. Данное обстоятельство будет полезно при развитии приборов, использующих сенсорные свойства графена. Эффект изменения сопротивления в среднем составляет 6–7% от общего сопротивления композита (подложки, покрытой графеном) для капли объемом 0.5 мкл и графенового чипа площадью 0.5 см^2. Повышение сопротивления образца при высыхании капли можно объяснить легированием образца всевозможными органическими примесями.

Литература

1. *Andryushchenko V. A.* [et al.]. Graphene-polymer composite conductivity in air and water // Applied Surface Science. 2021. V. 567: 150843.
2. *Andryushchenko V. A.* [et al.]. Control of graphene adhesion to substrate during transfer through liquid // Journal of Molecular Liquids. 2024. V. 395: 123827.

УДК 538.945

Численное моделирование сверхпроводящих интерферометров

***И. Е. Тарасова*[1,2], *Л. Н. Карелина*[2], *Н. С. Шуравин*[2], *А. С. Ионин*[1,2], *Ф. А. Разоренов*[1,2], *В. В. Больгинов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН

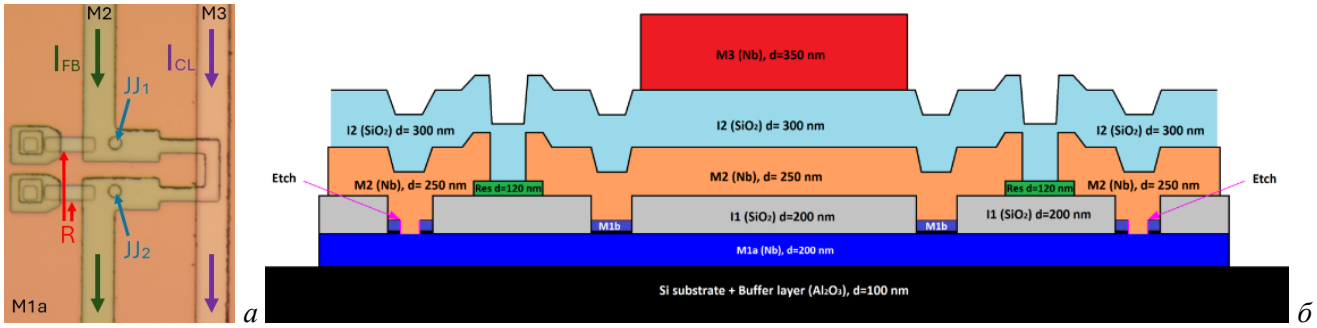
В настоящий момент сверхпроводящие квантовые интерферометры (SQUID) широко применяются в практических целях. В частности, они являются активными логическими элементами в устройствах цифровой сверхпроводящей электроники (быстрая одноквантовая логика, БОК). Простейшие интерферометры состоят из одного или двух контактов Джозефсона, замкнутых в петлю при помощи сверхпроводящей индуктивности. Ранее было показано, что такие объекты могут быть полезны для реализации сверхпроводящих нейронных сетей, поскольку способны выполнять нелинейное преобразование входного сигнала (магнитного потока) посредством сигмоидальной [1] или гауссовой [2] зависимости. Для наилучшего совпадения реальной передаточной функции такого устройства с «целевой» необходим тщательный подбор индуктивностей их элементов [1, 3]. Поэтому создание интерферометров с заранее заданными свойствами требует численного моделирования их параметров в процессе проектирования.

Одним из наиболее доступных инструментов для российских разработчиков является программа wxLL [4], выполняющая решение уравнений Максвелла и Лондонов для нахождения распределения векторного потенциала и энергии системы индуктивных сверхпроводящих линий. Результатом расчетов является матрица погонных индуктивностей для заданной конфигурации слоев сверхпроводников и изоляторов с определенными толщинами, профилями (можно задать изменение толщины слоев в зависимости от координаты на подложке в случае непланаризованной структуры) и глубинами лондоновского проникновения.

Результаты моделирования в wxLL сравнивались с результатами экспериментального исследования двухконтактных интерферометров различных конфигураций. Изготовление образцов производилось по технологическому процессу УНУ «Криоинтеграл» (рис. 1*б*). Каждая структура (рис. 1*а*) содержала три функциональных сверхпроводящих слоя (рис. 1*б*): ниобиевый экран толщиной 200 нм, являвшийся к тому же нижним электродом контактов Джозефсона (соответствует M1a на рис. 1*б*); а также два «индуктивных» слоя толщиной 250 нм (M2) и 350 нм (M3), использовавшихся для формирования индуктивных элементов (в частности, петли SQUID) и подключения к джозефсоновским контактам. Изучавшиеся конструкции отличались взаимным расположением, формой и номиналом (длиной петли) индуктивных элементов. Предметом исследования была точность прогнозирования индуктивностей элементов интерферометров при использовании программы wxLL.

Экспериментально индуктивности структур определялись по зависимостям напряжения на двухконтактном интерферометре U от внешнего магнитного поля при токе смещения, близком к критическому. Зависимости были получены в температурном диапазоне 2,7–9,0 К. При этом магнитный поток в петлю SQUID задавался либо током линии обратной связи I_{FB} (для определения собственной индуктивности L), либо током контрольной линии I_{CL} (для определения взаимной индуктивности M). Период осцилляций $U(H)$ двухконтактного интерферометра в нестационарном режиме соответствует кванту

магнитного потока Φ_0, поэтому: $L = \frac{\Phi_0}{\Delta I_{FB}}$, $M = \frac{\Phi_0}{\Delta I_{CL}}$. Периоды ΔI_{FB}, ΔI_{CL} определялись из спектральных характеристик снятых зависимостей. Такой метод позволяет исключить из рассмотрения высокочастотные шумы и дрейф измерительных приборов и легок в программном исполнении.



а *б*

Рис. 1. Оптическая фотография тестового двухконтактного интерферометра (*а*). JJ — джозефсоновские контакты интерферометра; R — шунтирующие их сопротивления, I_{OC}, I_{CL} указывают направления токов по линии обратной связи и контрольной линии. Схематическое изображение поперечного сечения образца с указанием названий слоев и их толщин (*б*). Высоты не в масштабе

В ходе моделирования были рассчитаны погонные собственные индуктивности для переменных по длине участков петли интерферометра. Также рассчитывалась их погонная взаимная индуктивность к контрольной линии. Ширина индуктивных линий составляла 4–10 мкм. Проверялась зависимость результатов расчета от расстояния между узлами сетки. С уменьшением шага дискретизации вычисленная погонная индуктивность практически не меняется (флуктуирует менее, чем на 0,1%), что указывает на сходимость применяемого программой алгоритма.

Сравнивая измеренные индуктивности интерферометров с разными длинами петель и областей наложения с контрольной линией, можно экспериментально получить погонные собственную и взаимную индуктивности (или индуктивности на квадрат) элементов SQUID. Расхождение расчетных и полученных экспериментально погонных индуктивностей составило 0,2–0,3% (и собственных, и взаимных).

Из погонных индуктивностей, рассчитанных в wxLL, можно вычислить полные индуктивности интерферометров, предполагая, что индуктивность поворотного квадрата равна половине индуктивности «прямого» квадрата, а индуктивности прямых участков плеч SQUID суммируются (как использовалось ранее в работе [1]). Полные взаимные индуктивности интерферометров совпадают с высокой точностью (≈0,3%), в то время как расчетные полные собственные индуктивности больше измеренных на ≈0,2 пГн (2–4%). Для более точного расчета полных индуктивностей необходим учет планарной геометрии интерферометров, а следовательно, использование «трехмерной» программы (например, 3D-MLSI [5]).

Таким образом, в работе проведены тестовые эксперименты на простых пробных структурах (двухконтактных интерферометрах) для точного проектирования и расчета нейронов. Апробирована программа wxLL и продемонстрирована сходимость численного алгоритма. Получено хорошее соответствие с экспериментом (не хуже 0,3%) рассчитанных собственных и взаимных индуктивностей для сечений сложной формы, моделирующих реальные образцы. Полученные данные говорят о высоком потенциале программы wxLL для проектирования сверхпроводящих интерферометров.

Работа проводились при поддержке гранта РНФ № 23-72-00053.

Литература

1. *Ионин А. С.* [и др.]. Экспериментальное исследование прототипа сверхпроводящего сигма-нейрона для адиабатических нейронных сетей ЖЭТФ. 2023. Т. 164. № 6(12). С. 1008–1021.
2. *Ионин А. С.* [и др]. Экспериментальное исследование передаточной функции прототипа сверхпроводящего гаусс-нейрона // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. № 10. С. 761–768.
3. *Soloviev I. I.* [et al.]. Adiabatic Superconducting Artificial Neural Network: Basic Cells // J. Appl. Phys. 2018. V. 124(15): 152113.
4. *Khapaev M. M.* Extraction of inductances of a multi-superconductor transmission line // Supercond. Sci. Technol. 1996. V. 9(9). P. 729–733.
5. *Khapaev M. M.* [et al.]. 3D-MLSI: software package for inductance calculation in multilayer superconducting integrated circuits // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2001. V. 11(1). P. 1090–1093.

УДК 538.971

Угловые зависимости распыления InSb фокусированным пучком ионов галлия

***К. Н. Лобзов*[1], *М. А. Смирнова*[2], *Л. А. Мазалецкий*[1,2], *Д. Э. Пухов*[2]**

[1]Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова
[2]Ярославский филиал физико-технологического института им. К. А. Валиева РАН

Распыление фокусированным ионным пучком (ФИП) находит все большее распространение в современной микро- и наноэлектронике как перспективный метод формирования наноструктур контролируемых размеров на поверхности материалов. В связи с этим интерес к исследованиям взаимодействия ФИП с поверхностью в последнее время неуклонно растет. Однако наноструктурирование ионным пучком обладает рядом специфических особенностей (развитие рельефа поверхности, порообразование, распыление переосажденного материала и т. д.). Таким образом, существует необходимость предварительного математического моделирования, учитывающего эти особенности. Точное значение коэффициента распыления и концентрации имплантированных ионов в приповерхностном слое являются необходимыми элементами для построения качественной модели процесса.

На сегодняшний день в литературе представлен достаточно большой объем как экспериментальных, так и теоретических данных, описывающих процесс ионного распыления наиболее распространенных в нанотехнологии чистых химических элементов, таких как Si, C, Ge и некоторых их соединений. В то же время до сих пор существует крайне мало исследований, посвященных распылению ФИП составных материалов, в частности соединений группы A_3B_5, хотя последние находят все большее применение в современной наноиндустрии.

В настоящей работе в качестве исследуемого материала был выбран InSb. Интерес к этому материалу вызван развитием на поверхности устойчивого рельефа в виде выступающих вверх конусов (так называемые наностержни) при ионном распылении, о чем свидетельствует ряд публикаций [1–4]. Однако практически все представленные исследования посвящены измерению формы и размеров образующихся структур при различных флюенсах и энергиях бомбардирующих ионов, в то время как угол падения ионного пучка также крайне важен для изучения процесса образования и эволюции рельефа. Немаловажными моментами остаются определение элементного состава поверхностных конусов для объяснения природы их возникновения и вопрос о влиянии данной структуры на общий выход распыления.

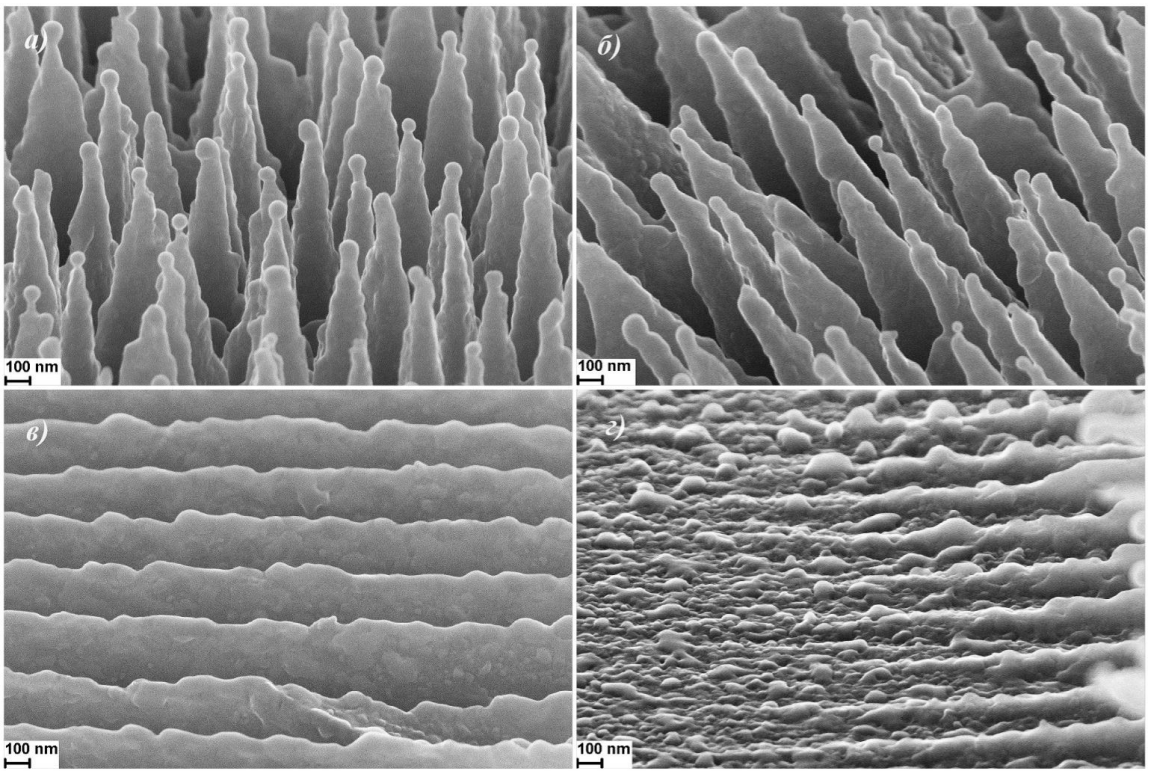


Рис.1. РЭМ изображения топографии облученной поверхности InSb при различных углах падения первичных ионов Ga^+: а) $\theta = 0^o$, б) $\theta = 30^o$, в) $\theta = 60^o$, г) $\theta = 80^o$

В работе экспериментально получены угловая и дозовая зависимости коэффициента распыления (Y) антимонида индия (InSb) при бомбардировке ионами Ga^+ с энергией 30 кэВ на установке Quanta 3D 200i от FEI™. Угол падения ионов θ изменялся от 0 до 85º, флюенс D — от 10^{15} до 10^{18} см$^{-2}$. Методом ВИМС на установке IONTOF^5 измерено содержание имплантированных ионов в приповерхностном слое при различных θ и D. Методами РЭМ (SUPRA 40) и АСМ (СММ-2000) исследована топография облученной поверхности. Было обнаружено, что при изменении угла падения первичных ионов конусы на поверхности поворачиваются в направлении, противоположном направлению пучка, на угол, близкий к углу падения ионов. При угле θ = 60º поверхностная структура принимает вид волнообразного микрорельефа (так называемых риплов), и при θ = 80º угасает до отдельных неровностей, как показано на рис. 1.

Экспериментальные результаты также сравниваются с данными математического моделирования в программе TRIDYN [5]. Обсуждается важность правильного выбора матрицы значений энергии связи с поверхностью (E_{sb}) для получения достоверных результатов моделирования, на основе работы [6] приводятся рассуждения относительно возможных подходов определения E_{sb} для распыления InSb ионами галлия.

Литература

1. *Yanagida Y.* [et al.]. Nanoporous Structure Formation in GaSb, InSb, and Ge by Ion Beam Irradiation under Controlled Point Defect Creation Conditions // Nanomaterials. 2017. V 7(7): 180.
2. *Kang M.* [et al.]. Formation and evolution of ripples on ion-irradiated semiconductor surfaces // Appl. Phys. Lett. 2014. V. 104 (5): 052103.
3. *Jany B. R.* [et al.]. Energy dependence of nanopillars formation on InSb semiconductor surfaces under gallium FIB and noble gas ions beam irradiation // Applied Surface Science. 2015. V. 327. P. 86–92.
4. *Miyaji T., Nitta N.* Nanoporous Structure Formation on the Surface of InSb by Ion Beam Irradiation // Nanomaterials (Basel). 2017. V. 7(8):204.
5. *Eckstein W.* Computer Simulation of Ion-Solid Interaction. — Berlin: Springer, 1991.
6. *Румянцев А. В.* [и др.]. Моделирование процесса распыления карбида кремния фокусированным пучком ионов галлия // Изв. вузов. Электроника. 2022. Т. 27. № 4. С. 463–474.

УДК 537.6/.8, 537.9

Микромагнитное моделирование динамики переключения гетероструктуры мультиферроик/ферромагнетик в МЭСО-устройствах

***Л. Г. Натекин*[1,3], *К. А. Звездин*[1,3], *П. Н. Скирдков*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН
[3]ООО «Новые спинтронные технологии»

В настоящее время большой интерес привлекают МЭСО-устройства (магнитоэлектрические спин-орбитальные), которые представляют из себя гетероструктуру, состоящую из двух основных систем: магнитоэлектрической, с помощью которой производится энергоэффективная запись информации, и спин-орбитальной системы, используемой для считывания. Активная разработка подобных устройств ведется такими компаниями как IMEC, IBM, Intel и др. В первую очередь, это обусловлено тем, что МЭСО-устройства могут стать прорывом в решении проблем дальнейшей миниатюризации, повышения быстродействия и энергоэффективности вычислительных устройств. Концепт МЭСО-устройства представлен в работе [1], а экспериментальная реализация магнитоэлектрической части в [2].

В данной работе, в микромагнитном приближении, была рассмотрена гетероструктура мультиферроик/ферромагнетик, являющаяся магнитоэлектрической частью МЭСО-устройства. При этом микромагнитное приближение позволяет в полном объеме учитывать неоднородную динамику, что является существенным при описании быстрых нелинейных переключений. Были выведены основные уравнения динамики ферромагнитного, антиферромагнитного векторов и вектора поляризации, полностью описывающие состояние кристалла мультиферроика, являющегося сегнетоэлектриком и антиферромагнетиком одновременно [3]. Под эти уравнения подобраны разностные схемы, согласованные как по времени, так и по пространству. При этом, предложен способ вычисления всех уравнений Максвелла, являющихся вспомогательными для уравнений динамики. В качестве модели взаимодействия слоев взята атомистическая модель в полуклассическом приближении. Полученная численная модель позволяет произвести

численную оценку скорости процесса переключения магнитоэлектрической части МЭСО-устройства. Моделирование показывает, что в зависимости от параметров слоя мультиферроика и ферромагнетика характерное время переключения ферромагнитного вектора, отвечающего за переключение намагниченности в ферромагнитном слое, имеет порядок 10–100 пс. Мы также получили численным образом конфигурации параметров мультиферроика, при котором возможно переключение намагниченности ферромагнитного слоя.

Авторы выражают благодарность Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за финансирование работ в рамках Соглашения №075-11-2022-046.

Литература

1. *Manipatruni S., Nikonov D. E.* [et al.]. Scalable energy-efficient magnetoelectric spin-orbit logic // Nature. 2019. V. 565. P. 35–42.
2. *Wang J., Hu J.* [et al.]. Magnetization reversal by out-of-plane voltage in $BiFeO_3$ multiferroic heterostructures // Sci. Rep. 2015. V. 5: 10459. DOI: 10.1038/srep10459.
3. *Звездин А. К., Мухин А. А.* О влиянии неоднородного магнитоэлектрического (флексомагнитоэлектрического) взаимодействия на спектр и свойства магнонов в мультиферроиках // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 89. № 7. С. 385–390.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Наблюдение ферромагнитного фазового перехода в сильно-коррелированной системе с псевдоспиновой степенью свободы в условиях приложенного механического напряжения

***С. А. Андреева*[1,2], *А. В. Щепетильников*[1,2], *А. Р. Хисамеева*[2], *Г. А. Николаев*[2,3], *И. В. Кукушкин*[2]**

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Физика конденсированного состояния богата красивыми фундаментальными явлениями, возникающими в системах с сильным электрон-электронным взаимодействием, такими как дробный квантовый эффект Холла, Вигнеровская кристаллизация, Стонеровская неустойчивость. Помимо многочастичных корреляций физику наблюдаемых эффектов значительно обогащает существование дополнительной степени свободы — псевдоспина. О псевдоспине принято говорить в случае систем с двойными квантовыми ямами, систем из слоев, разделенных туннельным барьером, но чаще всего — в случае многодолинных полупроводников, например, AlAs. Изучение поведения таких систем с помощью контролируемого изменения энергетического спектра позволяет решать задачи, находящиеся на переднем крае фундаментальной науки, а также создавать прототипы принципиально новых устройств и компонентов электроники на основе спиновой или псевдоспиновой степени свободы.

В работе было проведено исследование эволюции псведоспиновой степени свободы в режиме квантового эффекта Холла при приложении механического напряжения. Образец представлял собой гетероструктуру с квантовой ямой AlAs шириной 15 нм, выращенной посредством молекулярно-лучевой эпитаксии в направлении [001]. На поверхности образца была сформирована меза в форме мостика Холла. Для подведения механической деформации образец наклеивался на пьезоактуатор, с другой стороны которого был прикреплен тензометрический датчик. Кристаллографическое направление [010] образца было ориентировано вдоль направления приложения деформации. Эксперименты проводились при температуре 0.5 К в постоянном магнитном поле вплоть до 15 Тл.

Прикладываемое к образцу механическое напряжение позволило снять вырождение плоскостных долин и непрерывно изменять их энергетическое расщепление. Относительная заселенность долин оценивалась при помощи методики электрически детектируемого электронного спинового резонанса. При этом особенности анизотропии фактора Ланде плоскостных долин позволяли наблюдать спиновый резонанс электронов от каждой из них независимо. Анализ амплитуд этих резонансов позволил отследить эволюцию псевдоспиновой степени свободы в условиях изменяющегося междолинного расщепления.

В данной работе был обнаружен и исследован ферромагнитный фазовый переход, связанный с крупномасштабным изменением псевдоспиновой поляризации системы вблизи фактора заполнения 2. Такой переход сопровождался появлением особенности в продольном сопротивлении образца в зависимости от приложенного механического напряжения в фиксированном магнитном поле. Псевдоспиновый

характер такого перехода однозначно идентифицируется по изменению относительной амплитуды спиновых резонансов каждой из долин.

Работа была выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант №20-72-10097).

УДК 538.958, 538.977

Разработка квантового симулятора на основе двумерной муаровой структуры: оптические исследования

***Э. О. Чиглинцев*[1,3], *А. Н. Абрамов*[2,3], *В. А. Кравцов*[2,3], *А. И. Чернов*[1,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Высшая инженерно-техническая школа, университет ИТМО
[3]Российский квантовый центр

Структуры на основе Ван-дер-Ваальсовых материалов уже нашли применение во многих областях, в частности, в качестве фотодетекторов в широком спектральном диапазоне [1]. Данная работа посвящена новому направлению исследований: разработке, сборке и оптическому исследованию двумерной повернутой муаровой структуры из гомослоев диселенида вольфрама для квантового моделирования сильно коррелированных состояний вещества [2]. Выбор такого материала обусловлен сильным оптическим откликом [3].

Для экспериментального изучения было создано устройство с муаровой структурой на основе двух монослоев диселенида вольфрама с верхним и нижним затворами электрического напряжения для независимого контролирования коэффициента заполнения носителями заряда Муаровой решетки и электрического поля, проникающего в повернутую структуру. Сборка устройства выполнена с помощью метода сухого переноса. Подобная конфигурация структуры позволила изучить поведение экситонов при различных полях смещения и коэффициентах заполнения носителей. Угол поворота между двумя монослоями был выполнен с помощью техники “tear-and-stack” технологии на вращающемся столике и составил два градуса относительно друг друга. Золотые контакты напылены на графиты, расположенные под и над гомоструктурой, каждый из которых действует как затвор, и прямой контакт к повернутой структуре, с помощью литографии. Поперечный размер области для оптического возбуждения и считывания составляет около 7 мкм × 5 мкм, как указано на рис. 1.

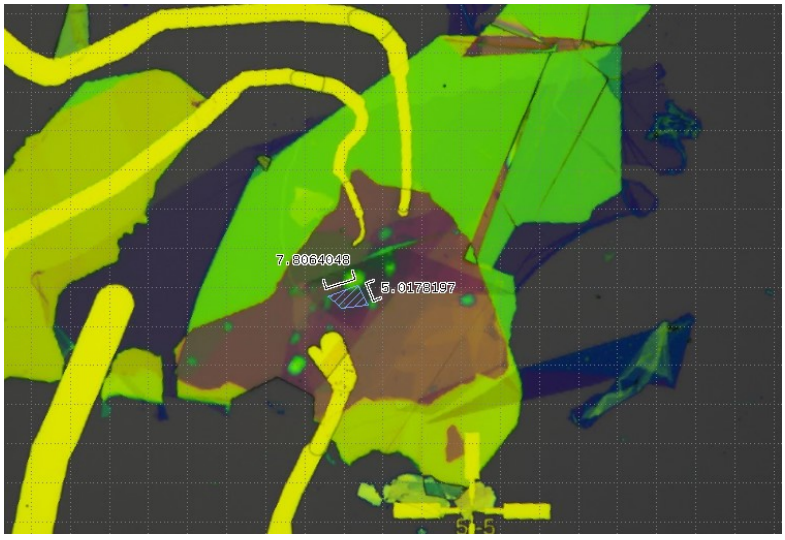


Рис. 1. Готовое устройство для изучения поведения экситонов в Муаровой решетке. Штрихованным обозначена повернутая зона Муара для оптических измерений в зависимости от ее допирования и прикладывания поля смещения

Измерения фотолюминесценции проводились при низкой температуре (8 К) с использованием HeNe-лазера с длиной волны 633 нм. Было исследовано поведение экситонов при изменении напряжения на электрических затворах. Ниже 1,6 эВ наблюдалось расщепление межслоевых экситонов и линейный штарковский сдвиг из-за электрического поля в бислое (рис. 2), как и в работе [4]. Наклон кривой позволяет

рассчитать расстояние между дыркой и электроном в межслоевом экситоне, равное 35 нм, что меньше межслойного расстояния (60 нм). Вероятно, эти наблюдения связаны с суперпозиционным взаимодействием межслойных экситонов: обменным притяжением и дипольным отталкиванием из-за послойного вырождения гомобислойной структуры [5]. Также был обнаружен резкий скачок пика фотолюминесценции межслойных экситонов с увеличением коэффициента заполнения Муаровой решетки. Мы предполагаем, что это может быть связано с сильным дипольным взаимодействием межслоевых экситонов с носителями зарядов. Данная проблема требует детального теоретического и экспериментального изучения.

Выше 1,6 эВ были обнаружены характерные особенности, относящиеся к внутрислоевым экситонам. Их поведение зависит от концентрации носителей заряда, но не от поля электрического смещения. Эти экситоны сконцетрированы в одном слое и не испытывают градиента электрического поля. Изменение концентрации приводит к созданию заряженных экситонов, темных экситонов, биэкситонов и т. д. [6].

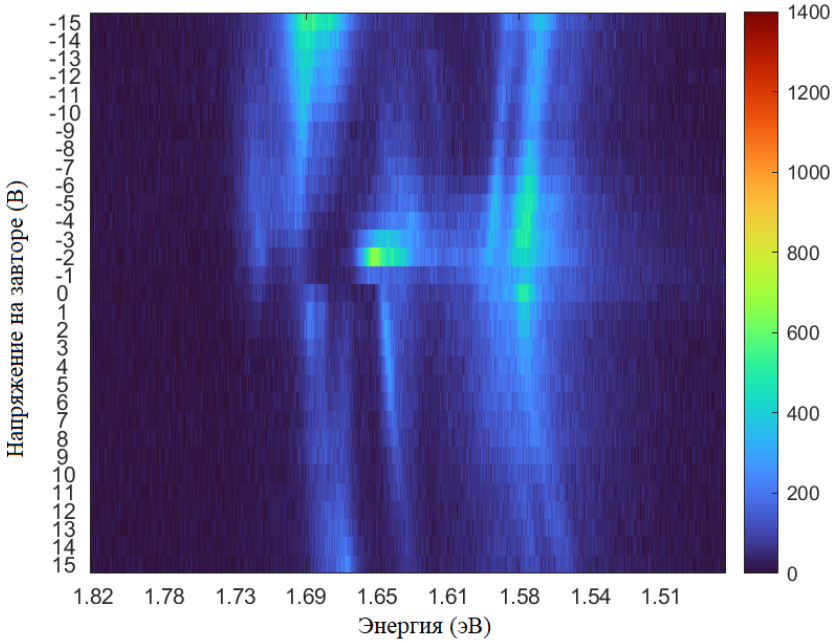


Рис. 2. Карта фотолюминесценции (ФЛ) образца. Характеристика ФЛ в зависимости от приложенного напряжения на верхнем затворе при постоянном напряжении 0,5 В на нижнем затворе. Шаг напряжения составляет 1 В

Нашим следующим шагом является изучение дипольного взаимодействия межслойных экситонов в зависимости от степени поляризации носителей в разных слоях, что может позволить получить возможность симуляции физики Бозе–Хаббарда. Мы также планируем проведение транспортных измерений образца в дополнение оптическим для регистрации фазового перехода металл-Моттовский изолятор, который сопровождается увеличением сопротивления при одночастичном заполнении Муаровой решетки [7].

Работа авторов была поддержана Росатомом в рамках Дорожной карты по квантовым вычислениям (контракт № 868-1.3-15/15-2021 от 5 октября).

Литература

1. *Mylnikov D.A.* [et.al.]. Infrared photodetection in graphene-based heterostructures: bolometric and thermoelectric effects at the tunneling barrier // npj 2D Mater Appl. 2024. V. 8: 34. DOI: 10.1038/s41699-024-00470-z.
2. *Fengcheng Wu* [et.al.]. Hubbard Model Physics in Transition Metal Dichalcogenide Moir´e Bands // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121: 026402. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.026402.
3. *Kravtsov V.* [et.al.]. Valley polarization of trions in monolayer MoSe2 interfaced with bismuth iron garnet // 2D Materials. 2021. V. 9(1): 015019. DOI: 10.1088/2053-1583/ac3887.
4. *Scuri G.* [et.al.]. Electrically Tunable Valley Dynamics in Twisted WSe2/WSe2 Bilayers // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124: 217403. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.217403.
5. *Tagarelli F.* [et.al.]. Electrical control of hybrid exciton transport in a van der Waals heterostructure // Nat. Photon. 2023. V. 17. P. 615–621. DOI: 10.1038/s41566-023-01198-w.
6. *Zhipeng Li* [et.al.]. Direct Observation of Gate-Tunable Dark Trions in Monolayer WSe2 // Nano Lett. 2019. V. 19(10). P. 6886–6893. DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b02132.
7. *Wang L.* [et.al.]. Correlated electronic phases in twisted bilayer transition metal dichalcogenides // Nat. Mater. 2020. V.19. P. 861–866. DOI: 10.1038/s41563-020-0708-6.

УДК 533.924

Исследование морфологии частиц, полученных безвакуумным электродуговым методом в системе «молибден-бор»

Ю. З. Васильева, Ю. А. Некля, М. Ю. Сперанский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Борид молибдена — это важное химическое соединение, которое имеет ряд уникальных свойств и находит применение в различных областях науки и промышленности. Он обладает высокой температурной стабильностью, жесткостью и прочностью, что делает его ценным материалом для использования в высокотемпературных приложениях [1]. Борид молибдена также обладает высокой температурой плавления и отличной устойчивостью к окислению и коррозии. Он имеет низкий коэффициент трения, высокую электропроводность и отличные механические свойства, что позволяет применять его в электронике, катализе и других областях. В промышленности борид молибдена используется в качестве теплозащитных покрытий, а также в конструкции деталей, работающих в агрессивных средах. Отмечается, что керамика с добавлением борида молибдена обладает высоким пределом прочности [2].

На сегодняшний день известно множество способов получения борида молибдена: самораспространяющийся высокотемпературный синтез — СВС, метод дуговой плавки, химическое осаждение из газовой фазы — CVD [3]. Одним из недостатков данных методов является требование инертной среды или создания условий вакуума. Это ведет к финансовым затратам, а также увеличению времени получения продукта. В последние годы заметен рост популярности безвакуумного электродугового метода [4]. Достоинством такого подхода является использование в качестве рабочей среды атмосферного воздуха, а также сравнительно небольшое время для реализации синтеза. В данной работе представлены исследования по получению борида молибдена при воздействии плазмы электродугового реактора переменного тока на смесь молибдена и бора. Целью исследования является изучение морфологии и элементного состава порошка борида молибдена, полученного безвакуумным электродуговым методом.

В экспериментальных исследованиях использовали электродуговой реактор с источником переменного тока. Выходы источника питания подключали к электродам, выполненным из графита. Анод выполнен в виде цилиндрического стержня диаметром 14 мм, длиной 100 мм. Катод выполнен в форме тигля с внутренним диаметром 30 мм. Перед началом эксперимента исходная смесь из микроразмерного молибдена и рентгеноаморфного бора помещали в тигель и накрывали графитовой крышкой. Затем устанавливали графитовый стержень над крышкой тигля. При включении источника питания дуговой разряд инициировался между анодом и крышкой тигля. В данном исследовании была использована смесь молибдена и бора, смешанная в атомном соотношении 1/5. При этом время поддержания дугового разряда составляло 50 с при значении силы тока 300 А. По окончании эксперимента полученный продукт собирали с тигля и анализировали методом растровой электронной микроскопии с помощью растрового электронного микроскопа марки Tescan VEGA3 — SBU с энергодисперсионной приставкой Oxford XMax-50.

На рис. 1 представлены результаты растровой электронной микроскопии полученного порошка борида молибдена.

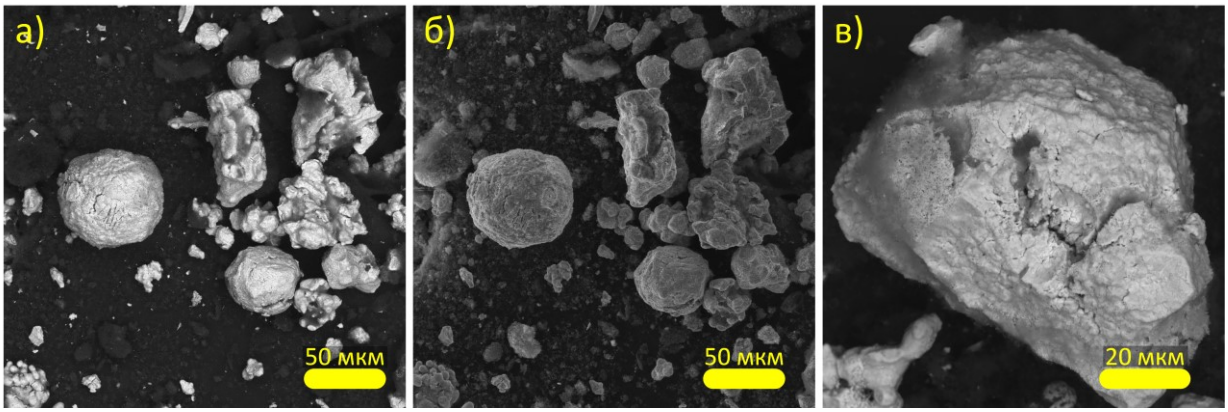


Рис. 1. Снимки растровой электронной микроскопии в режимах BSE (*а, в*) и SE (*б*)

По данным растровой электронной микроскопии выявлено несколько типов частиц. К первым относятся частицы округлой формы, ко вторым скопления частиц, образующие агломераты. Размер частиц

изменяется в диапазоне от 10 мкм до 70 мкм, а размер агломератов превышает 200 мкм. На рис. 2 приведен график распределения частиц борида молибдена по размерам. Широкое распределение по размерам частиц является следствием неоднородности температурного поля. Согласно результатам энергодисперсионного анализа в образцах идентифицируется наличие бора (44,15 ± 6,80 ат. %) и молибдена (13,75 ± 4,55 ат. %). В образце также зафиксировано наличие атомов азота (13,41 ± 3,81 ат. %), углерода (22,06 ± 5,53 ат. %), а также кислорода (2,64 ± 0,76 ат. %). Присутствуют примеси, а именно железо, сера и кремний, содержание которых не превышает 2 %.

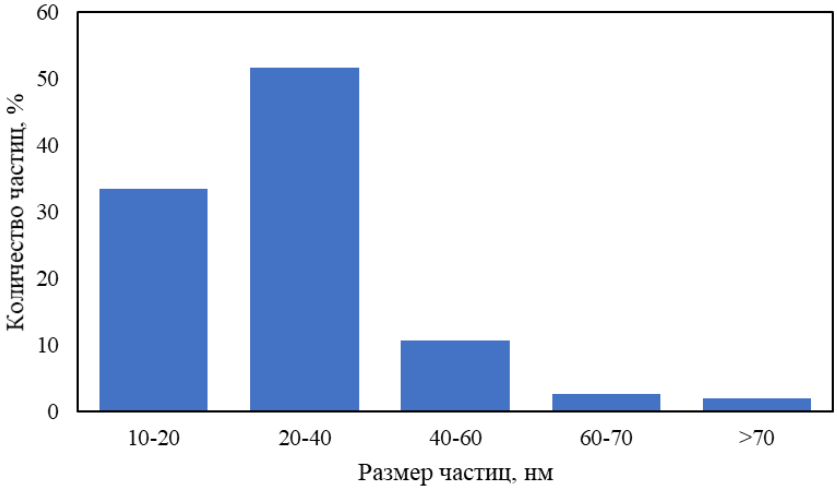


Рис. 2. График распределения частиц борида молибдена по размерам

Таким образом, в работе представлены экспериментальные исследования морфологии и элементного состава порошка борида молибдена, полученного безвакуумным электродуговым методом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01145, https://rscf.ru/project/23-79-01145/.

Литература

1. *Chong X. Y.* [et al.]. Stability, chemical bonding behavior, elastic properties and lattice thermal conductivity of molybdenum and tungsten borides under hydrostatic pressure Ceramics International. 2016. V. 42(2). P. 2117–2132.
2. *Cochran J. K., Daloz W. L., Marshall P. E.* Oxidation resistant Mo-Mo_2B-silica and Mo-Mo_2B-silicate composites for high temperature applications // Jom. 2011. V. 63. P. 44–49.
3. *Camurlu H. E.* Preparation of single phase molybdenum boride Journal of alloys and compounds. 2011. V. 509(17). P. 5431–5436.
4. *Васильева Ю. З., Пак А. Я.* Синтез карбида молибдена в самоэкранирующейся электродуговой плазме // Материаловедение. Энергетика. 2021. Т. 27. № 2. С. 62–72.

УДК авторами не указан

Алгебраическая модель несимметричного гаусс-нейрона

***Ф. А. Разоренов*[1,2], *А. С. Ионин*[1,2], *В. В. Больгинов*[1,2]**

[1]Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

За последние десять лет искусственные нейронные сети продемонстрировали свою эффективность и универсальность в задачах, связанных с обработкой больших объемов данных, прогнозированием, распознаванием образов, генерацией изображений и видео и т. д. Рост числа задач и объемов обрабатываемой информации актуализирует использование сверхпроводниковых элементов, обладающих преимуществами высокой тактовой частоты и энергоэффективности [1]. В работах [2, 3] были предложены сигма- и гаусс-нейроны, реализующие сигмоидальную или гауссову передаточную функцию соответственно. Они относятся к адиабатическому семейству сверхпроводящих логических элементов, чье энергопотребление может достигать фундаментального предела $kT \ln 2$ [4]. Адиабатические нейроны содержат один или два контакта Джозефсона (КД) для сигма- и гаусс-нейрона соответственно, замкнутые в сверхпрово-

дящее кольцо тремя индуктивными элементами. Такое устройство гораздо проще, чем устройство нейроморфных CMOS-элементов, содержащих порядка 20 транзисторов на ячейку, что также повышает энергоэффективность сверхпроводящих нейроморфных устройств.

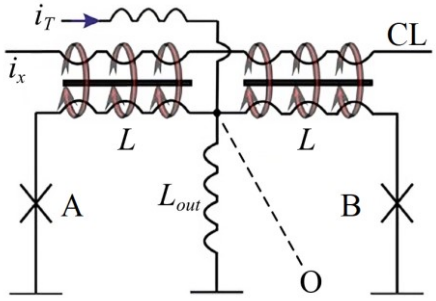


Рис. 1. Схематическое изображение гаусс-нейрона. Крестами обозначены контакты Джозефсона, волнистыми линиями — индуктивные элементы схемы

Данная работа посвящена исследованию гаусс-нейрона, схематически изображенного на рис. 1. Он состоит из трех плеч, соединенных в точке O и замкнутых на общий сверхпроводящий электрод («землю»). Подача и считывание сигнала (магнитного потока) осуществляется индуктивно. Два джозефсоновских, или приемных, плеча содержат индуктивные элементы L и контакты Джозефсона A, B. Третье плечо — выходное — состоит из индуктивного элемента L_{out}. Протекание тока i_x по контрольной линии CL, индуктивно связанной с приемными плечами, задает сигнал в схему, а считывание сигнала происходит при помощи СКВИДа с элемента L_{out}. Величина тока i_T, текущего по дополнительной токовой линии, определяет начальный магнитный поток Φ_{in} в контуре и влияет на форму передаточной функции нейрона.

Уравнения состояния гаусс-нейрона образуют систему из уравнения Кирхгофа и двух уравнений баланса фаз в частичных контурах нейрона, образованных выходным и одним из приемных плеч.

$$\begin{cases} I_c \sin\varphi_A + I_c \sin\varphi_B + I_{out} = 0, \\ \varphi_A + \dfrac{2\pi}{\Phi_0} L I_c \sin\varphi_A + \dfrac{2\pi}{\Phi_0}\Phi_{in} = \dfrac{2\pi}{\Phi_0} L_{out} I_{out} + \dfrac{2\pi}{\Phi_0}\Phi_b, \\ \varphi_B + \dfrac{2\pi}{\Phi_0} L I_c \sin\varphi_B - \dfrac{2\pi}{\Phi_0}\Phi_{in} = \dfrac{2\pi}{\Phi_0} L_{out} I_{out} + \dfrac{2\pi}{\Phi_0}\Phi_b. \end{cases}$$

Эти уравнения записываются в джозефсоновской нормировке, в которой ток измеряется в единицах критического тока I_c, магнитные потоки — в единицах приведенного кванта потока $\Phi_0/2\pi$, а индуктивности — в единицах джозефсоновской индуктивности $L_J = \Phi_0/2\pi I_c$.

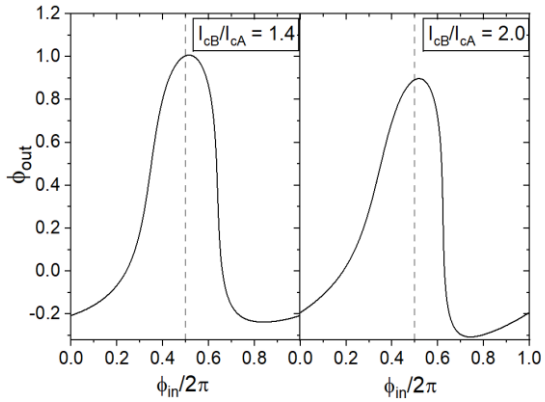


Рис. 2. Передаточная функция гаусс-нейрона с разными джозефсоновскими контактами, рассчитанная для двух значений отношения критических токов I_{cB}/I_{cA}.

В данной работе рассматривается гаусс-нейрон с нарушенной токовой симметрией, то есть с несовпадающими критическими токами джозефсоновских контактов. Показано, что система уравнений состояния несимметричного гаусс-нейрона допускает нормировку, задействующую оба критических тока и позволяющую получить решение для передаточной функции в виде двухпараметрической зависимости с

параметрами полусуммы и полуразности джозефсоновских фаз $\theta = (\varphi_B + \varphi_A)/2$, $\psi = (\varphi_B - \varphi_A)/2$, как это сделано в случае симметричного гаусс-нейрона, ранее рассмотренного в [5].

На рис. 2 проиллюстрировано изменение формы передаточной функции гаусс-нейрона при усугублении токовой асимметрии. Видно, что с ростом отношения критических токов форма кривой становится все менее симметричной, при этом одна ее часть становится более пологой, а другая — напротив, более «обрывистой». Асимметрия подобного рода наблюдалась и в эксперименте по реализации первого прототипа гаусс-нейрона [6]. Использование полученных формул позволяет учесть отклонение практического гаусс-нейрона от симметричной модели и точнее описать экспериментальные данные, в частности, получить оценку разницы критических токов, неизмеряемой экспериментально.

Литература

1. *Soloviev I. I.* [et al.]. Beyond Moore's technologies: operation principles of a superconducting alternative // Beilstein J. Nanotechnol. 2017. V. 8. P. 2689–2710.
2. *Klenov N. V.* [et al.]. Energy Efficient Superconducting Neural Networks for High-Speed Intellectual Data Processing Systems // IEEE Transactions on Applied Superconductivity, 2018. V. 28(7). P. 1–6.
3. *Soloviev I. I.* [et al.]. Adiabatic superconducting artificial neural network: Basic cells // J. Appl. Phys. 2018. V. 124(15): 152113.
4. *Takeuchi N., Yamanashi Y., Yoshikawa N*. Reversible logic gate using adiabatic superconducting devices // Sci. Rep. 2014. V. 4: 6354.
5. *Schegolev A*. *E.* [et al.]. Tunable superconducting neurons for networks based on radial basis functions // Beilstein J. Nanotechnol. 2022. V. 13. P. 444–454.
6. *Ионин А. С.* [et al.]. Экспериментальное исследование передаточной функции прототипа сверхпроводящего гаусс-нейрона // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118(10). С. 761–768.

Секция квантовой оптики и спектроскопии

Председатель: Л. А. Сурин (д. ф.-м. н.), В. В. Глушков (д. ф.-м. н.)

Зам. председателя: В. В. Медведев (к. ф.-м. н.)

Секретарь: А. В. Летохова

Дата: 04.04.2024 Время: 10:00

УДК 538.94

Динамические эффекты увлечения в двухкомпонентном бозе-конденсате

***А. Ф. Аминов*[1,2], *А. А. Соколик*[1,3], *Ю. Е. Лозовик*[1,3]**

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН
[3]Институт спектроскопии РАН

Эффекты увлечения (дрэг) встречаются как в физике конденсированной материи, так и в физике атомных газов, нейтронных звезд и экситонных поляритонов. *Диссипативный эффект кулоновского увлечения*, возникающий в связанных полупроводниковых квантовых ямах и гетероструктурах двумерных материалов, подробно изучался в электронных системах в нормальном (несверхтекучем) состоянии [1]. Для сверхтекучих и сверхпроводящих систем был предсказан *недиссипативный эффект увлечения* (или эффект Андреева-Башкина), при котором связывается движение сверхтекучих компонент взаимодействующих подсистем [2].

Кулоновский и недиссипативный эффекты увлечения обычно изучаются в статическом пределе ($\omega \to 0$), но недавно возник интерес к изучению эффектов увлечения и при конечных частотах [3], когда внешняя сила воздействует с частотой ω на одну компоненту системы, и измеряется ток, возникающий при этом в другой компоненте. Данный эффект в изотропных системах описывается матрицей проводимостей $\sigma_{ij}(\omega)$ (где i,j — индексы компонент). Главной особенностью эффекта увлечения при конечных частотах является сосуществование как диссипативного, так и недиссипативного отклика, при этом диссипативный эффект кулоновского увлечения и недиссипативный эффект Андреева-Башкина могут быть получены как частные случаи низкочастотного поведения транспроводимости $\sigma_{ij}(\omega)$.

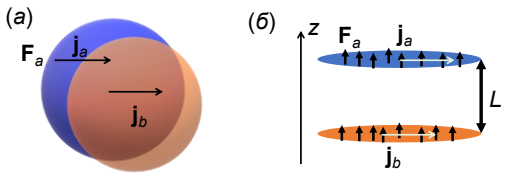


Рис. 1. Схематическое изображение изучаемых систем: *а* — трехмерные смеси атомных газов с контактным взаимодействием; *б* — двухслойные системы с диполь-дипольным взаимодействием. Сила F_a воздействует на компоненту *a*, что приводит к появлению тока как компоненты *a*, так и компоненты *b*

В представленной работе (см. препринт [4]) были проанализированы зависящие от частот проводимости $\sigma_{ij}(\omega)$ двухкомпонентного бозе-конденсата атомов при конечных температурах. В качестве реализаций двухкомпонентных бозе-систем, исследовались случаи трехмерных смесей ультрахолодных атомных газов с контактным взаимодействием (рис. 1*а*) и двухслойных пространственно разделенных атомных систем с дальнодействующим магнитным диполь-дипольным взаимодействием (рис. 1*б*). Изучалось поведение как внутрикомпонентных проводимостей (σ_{ii}), характеризующих нормальный и сверхтекучий отклики каждой компоненты, так и межкомпонентной проводимости (σ_{ab}), ответственной за нормальный и сверхтекучий эффекты увлечения. Был рассмотрен общий случай

несимметричной смеси газов с отличающимися атомными массами и с конечным временем жизни боголюбовских квазичастиц $\tau \sim \gamma^{-1}$.

Анализ выражений для проводимости позволил выделить резонансную частоту Δ, соответствующую процессам поглощения с преобразованием одного вида квазичастиц в другой, а также два режима, при которых оказалось возможным аналитически аппроксимировать $\sigma_{ij}(\omega)$: режим Друде на низких частотах ($\omega \ll \Delta$) и режим Лоренца вблизи резонансной частоты ($\omega \sim \Delta$). На рис. 2 приведен пример расчета транспроводимости для смеси двух газов ^{87}Rb с разными проекциями спина (рис. 2*а*, *б*) и для двухслойной системы атомов ^{168}Er с постоянным магнитным моментом (рис. 2*в*, *г*) для случаев слабого (*а*, *в*) и сильного (*б*, *г*) затухания γ. Как видно из рисунка, диссипативная часть транспроводимости $\sigma^{\mathrm{n}}_{ab}(\omega) = \mathrm{Re}\,\sigma_{ab}(\omega)$ имеет низкочастотный пик $[\omega^2 + 4\gamma^2]^{-1}$, аналогичный друдевскому пику проводимости в металлах, а недиссипативная часть транспроводимости $\sigma^{\mathrm{s}}_{ab}(\omega) = \mathrm{Im}\,\sigma_{ab}(\omega)$ расходится как ω^{-1}, что является проявлением сверхтекучести и эффекта сверхтекучего увлечения. На больших частотах вблизи резонанса $\omega \sim \Delta$ поведение траспроводимости качественно совпадает с поведением проводимости в модели Лоренца: резонансный пик $\sigma^{\mathrm{n}}_{ab}(\omega)$ и смена знака $\sigma^{\mathrm{s}}_{ab}(\omega)$. В случае двухслойной системы частоту резонанса можно регулировать, изменяя межслойное расстояние L.

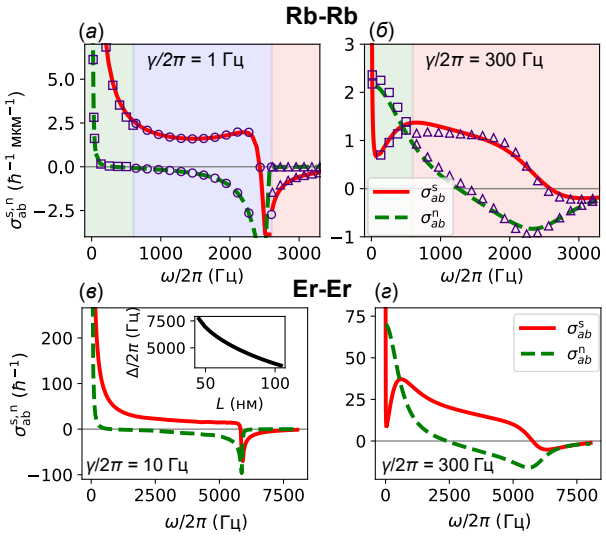


Рис. 2. Транспроводимость как функция частоты для трехмерных смесей атомов 87Rb с контактным взаимодействием (*а, б*) и двухслойных систем атомов 168Er с постоянным магнитным моментом при большом (*а, в*) и малом (*б, г*) времени жизни боголюбовских квазичастиц $\boldsymbol{\tau \sim \gamma^{-1}}$. Точки отвечают аналитическим аппроксимациям

Для детектирования эффектов увлечения в эксперименте предлагается измерять ток одной компоненты, появляющийся при воздействии на другую компоненту системы внешней силы $Fe^{-i\omega t}$ с конечной частотой ω. Токи в атомных газах обычно детектируются, например, с помощью фотографирования атомного облака через некоторое время после выключения ловушки, а создать осциллирующую силу можно с помощью градиента магнитного поля [5] или оптического пинцета, что позволяет создавать колебания атомных облаков с частотами до нескольких килогерц. Можно оценить, что в случае смеси газов ^{174}Yb-^{133}Cs для создания колебаний облака атомов ^{133}Cs с амплитудой порядка 10 мкм требуются реализуемые в экспериментах градиенты магнитного поля от 1 Гс/см (для $\omega/2\pi \sim 100$ Гц) до 2500 Гс/см (для $\omega/2\pi \sim 5000$ Гц). При этом отношение амплитуды колебаний x_{Yb} облака ^{174}Yb к амплитуде колебаний x_{Cs} облака ^{133}Cs получается порядка $x_{\mathrm{Yb}}/x_{\mathrm{Cs}} \sim$ 0,01—0,05, что мало, но детектируемо при достаточно больших x_{Cs}. В смеси атомов рубидия, к примеру, отношение амплитуд x_a/x_b может достигать 0,4.

Литература

1. *Narozhny B., Levchenko A.* Coulomb drag // Reviews of Modern Physics. 2016. V. 88(2): 025003.
2. *Andreev A., Bashkin E.* Three-velocity hydrodynamics of superfluid solutions // Sov. Phys. JETP. 1975. V. 42. P. 164–167.
3. *Sekino Y., Tajima H., Uchino S.* Spin conductivity spectrum and spin superfluidity in a binary Bose mixture // Phys. Rev. Research. 2022. V. 5(2): 023058.
4. *Aminov A., Sokolik A., Lozovik Yu.* Finite-frequency normal and superfluid drag effects in two-component atomic Bose-Einstein condensates // arXiv preprint. [2024]. arXiv: 2402.11606.
5. *Merloti K.* [et al.]. A two-dimensional quantum gas in a magnetic trap // New Journal of Physics. 2013. V. 15(3): 033007.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Метод оценки концентрации изомеров каротиноидов в растворах на основе полуклассических квантовых расчетов

***В. А. Курков*[1,2], *Д. Д. Чесалин*[1], *Р. Ю. Пищальников*[1]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нами предложен оригинальный подход к определению концентрации цис-изомеров каротиноидов в растворителях путем подгонки экспериментальных данных с помощью дифференциальной эволюции. Суммарный вклад *цис*-изомеров в результирующий оптический отклик моделировался гауссовой кривой, а спектр *транс*-изомера рассчитывался в рамках полуклассической теории.

Каротиноиды — одни из самых распространенных органических пигментов в природе. Они активно участвуют в химических и физических процессах живых организмов, таких как поглощение света, перенос электронов, удаление радикалов и многих других. Их оптические свойства определяются химической структурой, которая включает полиеновую цепь и концевые группы. В зависимости от условий окружающей среды каротиноиды могут находиться как в *транс*-, так и в *цис*-формации. Например, в растворителях молекулы пигментов в основном являются полностью *транс*-изомерами (до 90–95 %), в то время как в белке чаще всего встречаются различные *цис*-изомеры (рис. 1).

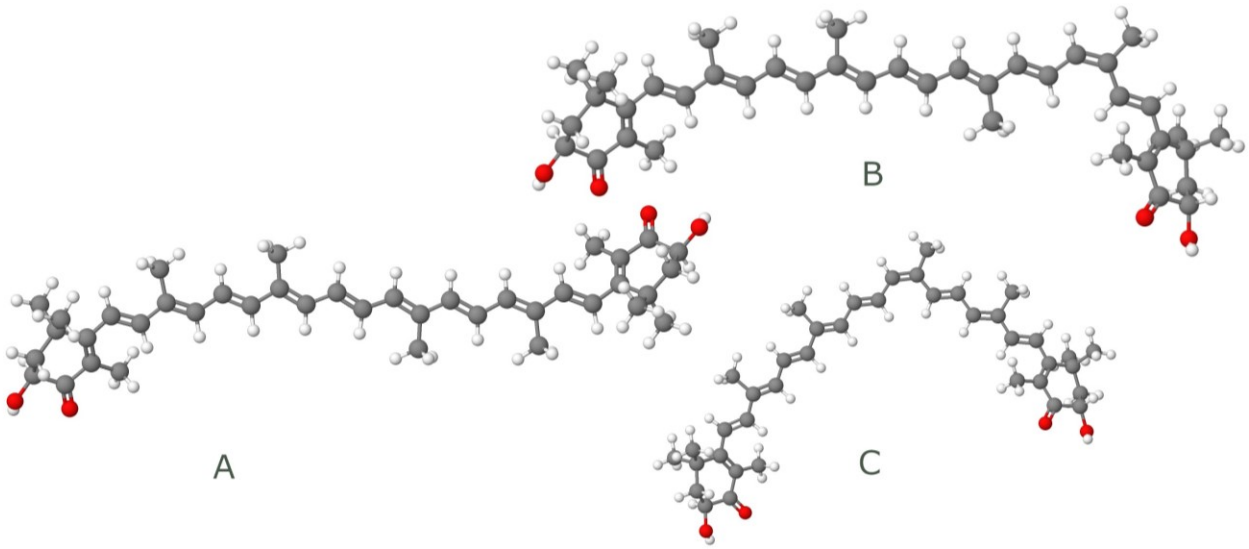


Рис. 1. Структурные формулы изомеров кантаксантина; *транс*- (A), *цис*-9 (B), *цис*-13 (C)

Линейный оптический отклик каротиноидов в диапазоне 400–600 нм (спектр поглощения) можно смоделировать, рассматривая двухуровневую систему из основного и возбужденного электронных состояний [1–3]. Возбужденное электронное состояние каротиноидов в этой области спектра соответствует оптически разрешенному $|S_2\rangle$ состоянию. Для расчета профиля поглощения была применена полуклассическая модель многомодового броуновского осциллятора. Гамильтониан системы включает электронные состояния, наборы вибронных мод и эффективные энергии взаимодействия между электронными и вибронными состояниями.

Спектры поглощения для электронных возбужденных состояний вычислялись с учетом взаимодействия электронных облаков молекулы и ее атомарного остова:

$$\sigma_{abs}(\omega) = \frac{1}{\pi} Re \int_0^\infty dt\, e^{i(\omega-\Omega_{eg})t} e^{-g(t)} e^{-\frac{1}{2}(\Delta t)^2} \qquad (1)$$

где Ω_{eg} — энергия электронного перехода, из основного состояния $|g\rangle$ в возбужденное $|e\rangle$. $\Delta = FWHM/2\sqrt{2 \cdot ln2}$ — величина стандартного отклонения распределения Гаусса, моделирующее неоднородное уширения спектра, являющееся следствием взаимодействия электронного состояния пигментной молекулы с ее ближайшим окружением. $g(t)$ — функция профиля линии, зависящая от набора вибронных мод и их интенсивности взаимодействия с электронным возбуждением. В общем виде она записывается следующим образом:

$$g(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1-\cos\omega t}{\omega^2} coth(\beta\hbar\omega/2)C''(\omega) - \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{sin(\omega t)-\omega t}{\omega^2} C''(\omega) \quad (2)$$

где $C''(\omega)$ — спектральная плотность, определяемая набором параметров $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$: ω_j — частота j-й моды, S_j — эффективный параметр взаимодействия электронного состояния с колебательным (Хуанг-Рис фактор), γ_j — параметр затухания j-ой моды:

$$C''(\omega) = \sum_j \frac{2S_j\omega_j^3\omega\gamma_j}{\left(\omega_j^2-\omega^2\right)^2+\omega^2\gamma_j^2} \quad (3)$$

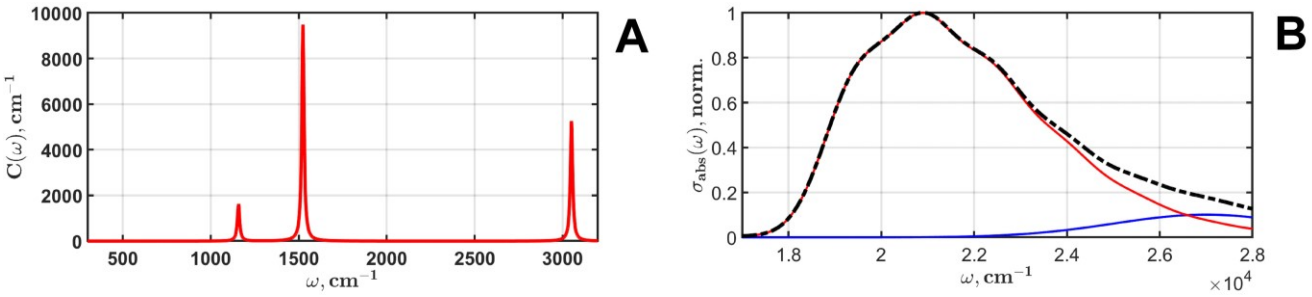


Рис. 2. Функция спектральной плотности, рассчитанная с учетом двух вибронных мод и одного обертона: $\nu_1 = 1524\ \text{см}^{-1}$, $\nu_2 = 1158\ \text{см}^{-1}$ и $\llbracket\ 2\nu_1 = 3048\ \text{см}^{-1}$ (А); смоделированный спектр поглощения каротиноида, соответствующий электронному переходу $|S_2\rangle \rightarrow |S_2\rangle$. Профиль поглощения представляет собой сумму вкладов *транс*- и *цис*-переходов (В)

Для моделирования теоретического спектра электронного поглощения нам необходимо подобрать параметры Ω_{eg}, Δ, и $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$ и подставить их в уравнения (1), (2) и (3). Подбор осуществляется с помощью алгоритма дифференциальной эволюции. Теоретический и расчетный спектры оцениваются с помощью функции невязки:

$$\chi^2(\mathrm{x}_i) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(I(\omega_n) - \sigma_{abs}(\omega_n, \mathrm{x}_i)\right)^2 \quad (4)$$

где x_i — параметры квантовой модели (Ω_{eg}, Δ, $\{\omega_j, S_j, \gamma_j\}$), подающиеся на вход оптимизационного алгоритма. Для расчета спектра астаксантина в формуле (3) использовалось 8 вибронных мод (рис. 2).

Литература

1. *Pishchalnikov R. Y., Bondarenko A. A., Ashikhmin A. A.* Optimizing the Multimode Brownian Oscillator Model for the Optical Response of Carotenoids in Solution by Fine Tuning of Differential Evolution // Lobachevskii J. Math. 2020. V. 41(8). P. 1545–1553.
2. *Pishchalnikov R. Y.* [et al.] The role of the local environment on the structural heterogeneity of carotenoid β-ionone ringsg // Photosynth. Res. 2023. V. 156. P. 3–17.
3. *Chesalin D. D.* [et al.] Differential evolution reveals the effect of polar and nonpolar solvents on carotenoids: A case study of astaxanthin optical response modeling // Swarm Evol. Comput. 2022. V. 75: 101210.
4. *Storn R., Price K.* Differential evolution — A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces // J. Glob. Optim. 1997. V. 11. P. 341–359.

УДК 535-32

Измерение коэффициента отражения ЭУФ излучения в скользящем падении одноканальным методом

***В. М. Макарова*[1,2]**

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт спектроскопии РАН

В настоящем докладе сообщается о статусе проекта ЭУФ-рефлектометра скользящего падения, работа над которым ведется в отделе атомной спектроскопии ИСАНа. Рост интереса к диапазону экстремального ультрафиолета (ЭУФ), λ~10 нм вызван приложением к технологии нанолитографии [1]. Одним из основных методов для определения оптических констант в данном спектральном диапазоне является измерение

коэффициента отражения в скользящем падении. Наиболее точные эксперименты по измерению коэффициента отражения проводятся с использованием синхротронного излучения в качестве источника ЭУФ-излучения. В то же время применение лабораторных источников позволяет реализовать более простые и компактные рефлектометрические схемы, что дает возможность проведения экспресс-анализа образцов. В институте спектроскопии РАН был предложен одноканальный метод для проведения таких измерений [2, 3].

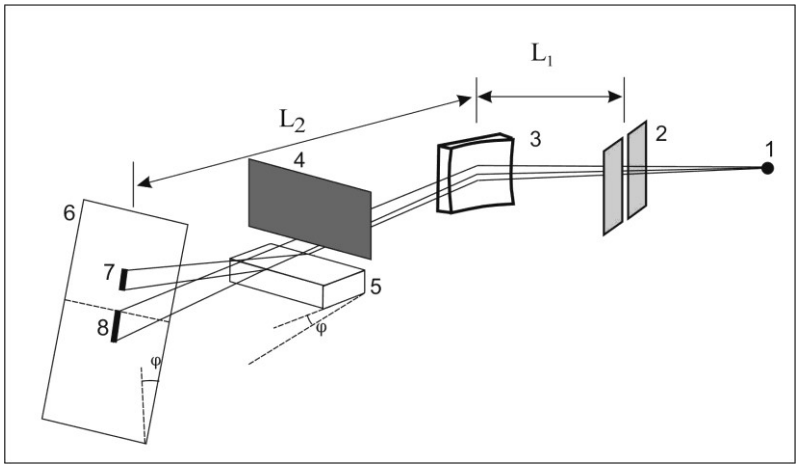


Рис. 1. Схема одноканальной методики измерения коэффициента отражения в скользящем падении: *1* — источник ЭУФ излучения; *2* — входная щель; *3* — сферическая дифракционная решетка; *4* — ножевая диафрагма; *5* — образец; *6* — плоскость регистрации; *7* — отраженная часть излучения; *8* — прошедшая часть излучения

Схема одноканального метода приведена на рис. 1. Основным элементом является спектрограф скользящего падения с регистрацией спектра излучения нормально к лучу зрения. Такая схема позволяет, при помещении исследуемого образца внутрь спектрографа, за одно измерение на матрице CCD-детектора одновременно регистрировать сигнал спектра отраженного и прошедшего излучения. Излучение содержит в себе лежащие в ЭУФ диапазоне спектральные линии многозарядных ионов, источник — быстрый капиллярный разряд.

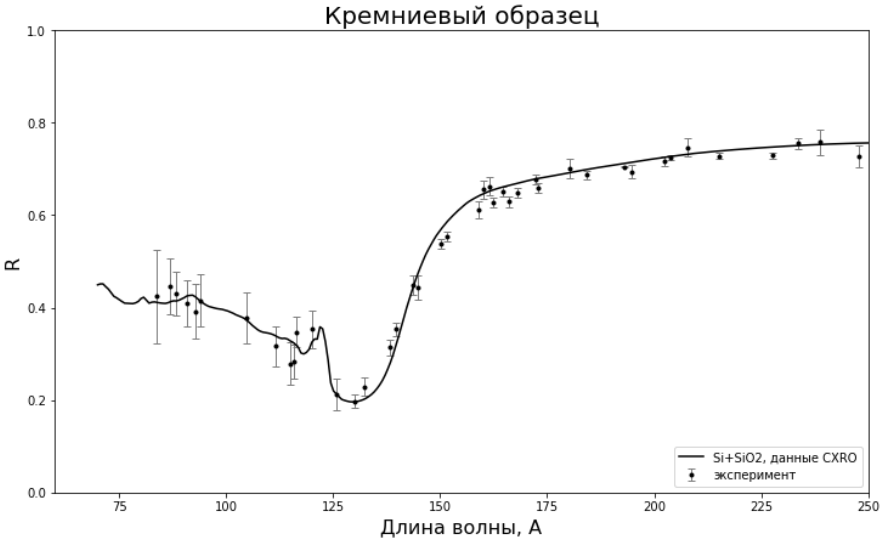


Рис. 2. Спектральная зависимость коэффициента отражения от кремния в диапазоне 8–25 нм. Точки — измеренные значение, кривая — данные базы CXRO [4]

В рамках проекта была разработана методика обработки экспериментальных спектрограмм для определения коэффициента отражения на отдельных спектральных линиях. Алгоритм основан на определении коэффициента отражения при помощи построения функции спектральной модуляции для спектров отраженного и прошедшего излучения. Получаемый разброс значений коэффициента отражения позволяет говорить о возможности достижения точности порядка 1%.

В докладе приводятся результаты эксперимента по измерению коэффициента отражения от кремниевого образца с углом скольжения 5° в спектральном диапазоне 8–25 нм (рис. 2) и от рутениевого

зеркала с углами скольжения 6° и 10° в спектральном диапазоне 15–40 нм. Также демонстрируется возможность использования одноканального метода для разделения порядков дифракции в ЭУФ-спектре.

Литература

1. *Banine V. Y., Koshelev K. N., Swinkels G. H. P. M.* Physical processes in EUV sources for microlithography // J. Phys. D: Appl. Phys. 2011. V. 44(25): 253001. DOI: 10.1088/0022-3727/44/25/253001.
2. *Abramenko D. B.* [et al.] Single-channel method for measuring the reflectance spectra of grazing incidence mirrors in the extreme ultraviolet range // Opt. Lett. 2019. V. 44(20): 4949. DOI: 10.1364/ol.44.004949.
3. *Анциферов П. С., Дорохин Л. А., Макарова В. М.* Методика определения коэффициента отражения в скользящем падении при использовании одноканальной схемы измерения // Оптика и спектроскопия. 2023. Т. 131. № 8. С. 1074–1079. DOI: 10.61011/OS.2023.08.56298.4846-23.
4. CXRO X-Ray Interactions With Matter [Электронный ресурс]. URL: https://henke.lbl.gov/optical_constants/ (дата обращения: 28.02.24).

УДК 539.196.5

Фотогенерация синглетного кислорода при УФ-возбуждении Ван-дер-Ваальсовых комплексов изопрена с кислородом C_5H_8–O_2 в молекулярном пучке

***В. М. Роговешко*[1,2], *А. В. Бакланов*[1]**

[1]Институт химической кинетики и горения СО РАН
[2]Новосибирский государственный университет

Фотохимия молекулы кислорода представляет большой интерес для исследований, так как фотопроцессы в молекулярном кислороде играют значительную роль в процессах фотоокисления, протекающих в атмосфере. К тому же, самое низкое по энергии синглетное состояние кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$ с энергией 0,98 эВ, успешно используется в фотодинамической терапии [1], дезинфекции питьевой воды [2] и усилении водородных пламен [3]. Однако в силу высокой симметрии кислорода, оптические переходы из основного состояния молекулы запрещены, в том числе переход в состояние $a^1\Delta_g$.

Известно, что наличие рядом с молекулой кислорода слабосвязанного молекулярного окружения, нарушающего симметрию, делает переход частично разрешенным, из-за чего сечение поглощения перехода может вырасти на порядки величины [4]. Так, при фотовозбуждении слабосвязанного комплекса $X-O_2$, где X — молекула окружения, может происходить процесс «двойной спин-флип», при котором комплекс возбуждается в триплетное состояние, но мультиплетность каждой из частиц комплекса изменяется:

$$^3(^1M{-}^3O_2\ X^3\Sigma_g^-) + h\nu \rightarrow\ ^3(^3M{-}^1O_2\ a^1\Delta_g) \rightarrow\ \ ^3M + {}^1O_2.$$

Наличие этого процесса установлено для ряда Ван дер Ваальсовых комплексов X–O_2 с различными X при возбуждении излучением в области длин волн короче 300 нм [5]. При этом вывод об образовании синглетного кислорода сделан на основании регистрации атомов кислорода с кинетической энергией, соответствующей ожидаемой для атомов, образующихся при фотодиссоциации синглетного кислорода. Образование синглетного кислорода при этом было позднее подтверждено его детектированием с помощью резонансно-усиленной-многофотонной ионизации (РУМФИ [(1+1')+1]) при возбуждении комплексов изопрена с кислородом $C_5H_8-O_2$ [6]. Недавно обнаружено образование синглетного кислорода при возбуждении столкновительных комплексов $C_5H_8-O_2$ под действием излучения с длиной волны больше 300 нм [7], что представляет интерес для фотохимии атмосферы. Для изучения природы этого процесса нами исследовано образование синглетного кислорода при фотовозбуждении Ван дер Ваальсовых комплексов $C_5H_8-O_2$, как модельной системы для столкновительных комплексов в атмосфере.

Комплексы $C_5H_8-O_2$ генерировались в импульсном молекулярном пучке. Для фотодиссоциации комплекса и ионизации молекулы кислорода использовалось излучение второй гармоники лазера на красителе с длиной волны около 312 нм. Образование синглетного кислорода подтвердилось появлением сигнала иона при добавлении в молекулярный пучок к кислороду изопрена. Был снят спектр резонансной усиленной многофотонной ионизации РУМФИ (2+1) (рис. 1) с использованием двухфотонного разрешенного перехода $^1\Pi_g(\nu=3) \leftarrow\leftarrow a\,^1\Delta_g(\nu=0)$ и последующей однофотонной ионизацией. Форма спектра совпадает с литературным РУМФИ спектром синглетного кислорода, измеренным в работе [8].

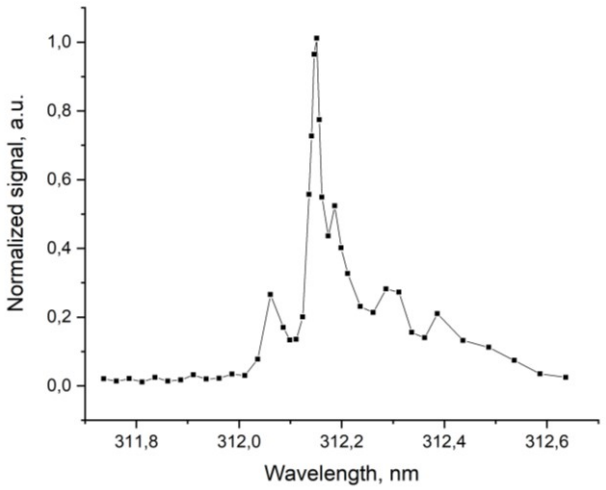


Рис. 1. Спектр РУМФИ(2+1) синглетного состояния молекулы кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$

Также с помощью техники визуализации карт скоростей было показано, что вклад в сигнал сносят в основном «горячие» молекулы кислорода, имеющие поперечную по отношению к молекулярному пучку скорость. Такую скорость молекулы кислорода могут приобрести только при фотодиссоциации из комплекса с другими частицами. К тому же, с увеличением концентрации изопрена в газовой смеси наблюдался линейный рост сигнала синглетного кислорода. Это говорит о том, что синглетный кислород образуется из комплексов состава 1:1, а комплексы, содержащие больше 1-й молекулы изопрена, не дают вклада.

Авторы благодарят за поддержку Российский научный фонд (проект № 23-23-00275).

Литература

1. *Li X., Lee S., Yoon J.* Supramolecular photosensitizers rejuvenate photodynamic therapy // Chemical Society Reviews. 2018. V. 47(4). P. 1174-1188.
2. *Loeb S., Hofmann R., Kim J. H.* Beyond the pipeline: assessing the efficiency limits of advanced technologies for solar water disinfection // Environmental Science & Technology Letters. 2016. V. 3(3). P. 73–80.
3. *Konnov A. A.* On the role of excited species in hydrogen combustion // Combustion and flame. 2015. V. 162(1). P. 3755–3772.
4. *Zelikina G. Y.* [et al Spectrum of induced absorption of oxygen in mixtures with various gases in the region of Herzberg photodissociation continuum // Optics and Spectroscopy. 1996. V. 81(5). P. 685–689.
5. *Baklanov A. V.* [et al.]. Singlet oxygen photogeneration from X–O_2 van der Waals complexes: double spin-flip vs. charge-transfer mechanism // Physical Chemistry Chemical Physics. 2015. V. 17(43). P. 28565–28573.
6. *Bogomolov A. S.* [et al.]. REMPI detection of singlet oxygen $^1O_2$ arising from UV-photodissociation of van der Waals complex isoprene-oxygen C_5H_8-O_2 // Chemical Physics Letters. 2018. V. 692. P. 271–276.
7. *Pyryaeva A. P.* [et al.]. Singlet Oxygen Generation via UV-A,-B, and-C Photoexcitation of Isoprene–Oxygen (C_5H_8–O_2) Encounter Complexes in the Gas Phase // The Journal of Physical Chemistry A. 2020. V. 124(41). P. 8469–8477.
8. *Morrill J. S.* [et al.]. Two-photon REMPI spectra from $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$ to $d^1\Pi_g$ in O_2 // Journal of Molecular Spectroscopy. 2003. V. 219(2). P. 200–216.

УДК 538.977

Временная динамика интенсивности фотолюминесценции квантовых точек теллурида кадмия

***Д. С. Дайбаге*[1,2], *С. А. Амброзевич*[1,2], *А. С. Селюков*[1,2,3]**

[1]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[3]Московский политехнический университет

Коллоидные квантовые точки (КТ) привлекают к себе большое внимание вследствие квантового-размерного эффекта [1]. Варьируя средний размер наноструктур, можно управлять оптическими свойствами нанокристаллов [1]. Известно, что интенсивность фотолюминесценции (ФЛ) КТ с течением

времени может как уменьшаться (фотодеградация) [2], так и увеличиваться (фотоусиление) [3]. Покрытие нанокристаллов оболочкой может позволить достичь большей фотостабильности [4, 5], однако не всегда удается в полной мере реализовать потенциал данного подхода. На сегодняшний день установлена фотостабильность ширины запрещенной зоны КТ CdTe, покрытых оболочкой из SiO_2 при повышении температуры [5]. В свою очередь, фотостабильность интенсивности ФЛ при непрерывном оптическом облучении ранее не изучалась.

Временная динамика интенсивности ФЛ КТ CdTe/SiO_2 исследовалась путем регистрации спектров люминесценции при непрерывном лазерном облучении. Эксперимент состоял из двух этапов «Этап 1» и «Этап 2». В начале КТ облучались в течение 110 минут (Этап 1), затем лазерное излучение выключалось на 1 час. После «перерыва» лазерное излучение снова включалось на 110 минут (Этап 2).

На рис. 1*а* представлена зависимость интегральной интенсивности (ИИ) ФЛ от времени при непрерывном оптическом возбуждении. Видно, что ИИ ФЛ квантовых точек CdTe/SiO_2 монотонно увеличивается. За все время экспериментов (280 мин) ИИ ФЛ увеличилась примерно на 22% (рис. 1*б*). Стоит отметить, что ИИ ФЛ также увеличилась на 5% (рис. 1*в*) за время, когда лазерное облучение отсутствовало.

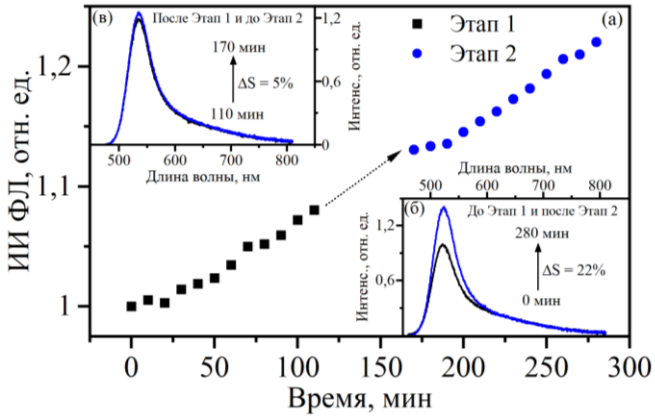


Рис. 1. Временная динамика ИИ ФЛ (*а*); спектры ФЛ в начале и конце Этапа 1 и Этапа 2 соответственно (*б*); спектры ФЛ в конце и начале Этапа 1 и Этапа 2 соответственно (*в*)

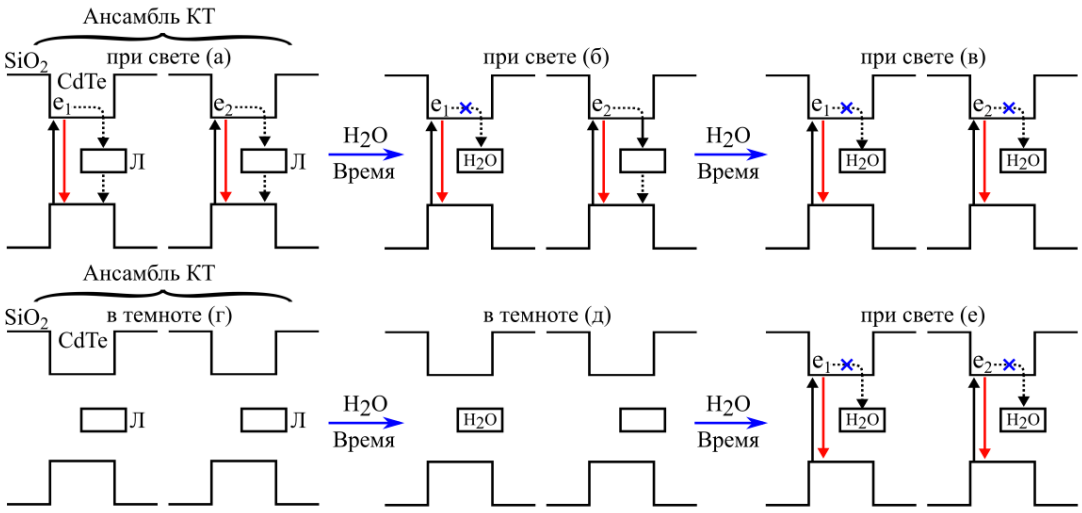


Рис. 2. Предлагаемый механизм фотоусиления интенсивности ФЛ КТ CdTe/SiO2 при непрерывном оптическом облучении

Перейдем к обсуждению возможных механизмов фотоусиления интенсивности ФЛ КТ CdTe/SiO_2 (рис. 2). В начальный момент времени (рис. 2*а*) при непрерывном лазерном облучении в ансамбле КТ происходит возбуждение (черная сплошная стрелка) электронов (e_1 и e_2), которые в дальнейшем могут релаксировать как излучательным (красная стрелка), так и безызлучательным образом (черная пунктирная стрелка) через ловушку (Л). Затем молекулы воды адсорбируются на поверхности нескольких КТ и пассивируют поверхностные ловушки (рис. 2*б*), тем самым уменьшая вероятность безызлучательных переходов, и, как следствие, увеличивая интенсивность ФЛ КТ [3]. С течением времени в ансамбле наночастиц количество КТ с пассивированными ловушками увеличивается (рис. 2*в*). Таким образом,

увеличивается количество излучательных переходов, что и вызывает увеличение ИИ ФЛ (рис. 1*а*) при непрерывном оптическом облучении. Рассмотрим теперь возможный механизм «в темноте», когда оптическое возбуждение отсутствует, воздействующий на дальнейшее увеличение интенсивности ФЛ при возобновлении оптического возбуждения. Пусть в «темноте» не происходит никаких переходов (рис. 2*г*). В действительности, конечно, возможны спонтанные безызлучательные переходы, но в нашем случае такие переходы не вносят значительный вклад в фотоусиление интенсивности. Поэтому они на рис. 2*г* отсутствуют. Предполагается, что в «темноте» процесс адсорбции молекул воды на поверхности КТ не прекращается, и пассивация ловушек продолжается (рис. 2*д*). Таким образом, количество КТ, у которых пассивированы ловушки, после нахождения в «темноте» оказывается больше, чем количество КТ с пассивированными дефектами в конце Этапа 1. Иными словами, вероятность излучательных переходов после нахождения КТ в «темноте» больше, чем в конце Этапа 1. Именно поэтому при включении лазерного излучения (рис. 2*е*) после нахождения КТ в «темноте» и наблюдается увеличение ИИ ФЛ квантовых точек относительно последнего спектра, зарегистрированного на Этапе 1.

Таким образом, в работе получен важный научный результат в виде фотоусиления ФЛ КТ при непрерывном лазерном облучении, который расширяет понимание физических процессов, протекающих в полупроводниковых нанокристаллах, что может способствовать повышению эффективности электронных и фотонных устройств на их основе.

Литература

1. *Kondratenko T. S.* [et al]. Size-dependent optical properties of colloidal CdS quantum dots passivated by thioglycolic acid // Semiconductors. 2018. V. 52. P. 1137–1144.
2. *Ovchinnikov O. V.* [et al]. Reverse photodegradation of infrared luminescence of colloidal Ag_2S quantum dots // Journal of Luminescence. 2019. V. 207. P. 626–632.
3. *Carrillo-Carrión C.* [et al]. Quantum dots luminescence enhancement due to illumination with UV/Vis light // Chemical Communications. 2009. V. 35. P. 5214–5226.
4. *Shim H. S.* [et al]. InP/ZnSeS/ZnS Quantum Dots with High Quantum Yield and Color Purity for Display Devices // ACS Applied Nano Materials. 2023. V. 6(2). P. 1285–1294.
5. *Levichev S.* [et al]. Thermal stability of energy-emission from CdTe nanocrystals embedded in SiO_2 thin films // Modern Physics Letters B. 2010. V. 24(29). P. 2837–2843.

УДК 535.36

УФ микроскоп для исследования биотканей в области 210–400 нм

***Д. О. Сариева*[1], *Ю. Г. Вайнер*[1,2,3], *В. Н. Крашенинников*[1,2]**

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт спектроскопии РАН

Возможности оптической микроскопии биологических тканей в нативных условиях сильно ограничиваются высокой прозрачностью большинства биологических объектов в ближней УФ, видимой и ближней ИК областях спектра и близостью значений коэффициента преломления воды и большинства фрагментов биологических тканей в этих областях. Для преодоления указанной трудности применяют окраску тканей, в частности фрагментов клеток, специальными красителями, что приводит к изменению свойств и функционирования изучаемых объектов. Эту трудность можно преодолеть переходом в дальнюю УФ область спектра, однако интенсивность обычно используемых источников излучения на основе ксеноновых и водородных ламп резко падает при переходе в область 250–200 нм. В последнее время для УФ микроскопии стали использовать УФ светодиоды, однако они излучают в узких участках спектра и не позволяют проводить измерения в области короче 250 нм.

В докладе сообщается о создании УФ микроскопа на основе нового источника света высокой яркости, излучающего в широкой области спектра от ближнего ИК диапазона до вакуумного УФ. Рассматривается принцип действия и устройство указанного источника света, сообщается о результатах исследования его энергетических и спектральных параметров. Рассматривается оптическая схема и конструкция созданного микроскопа, сообщаются результаты исследования его основных параметров. Приводятся результаты применений созданного микроскопа для исследования ряда биологических объектов, в частности срезов тканей почек человека, пораженных раковой опухолью; распределение оптической плотности

в небольшом участке данного препарата приведено на рис. 1. Обсуждаются перспективы применения созданного УФ микроскопа для исследования биологических тканей и диагностики заболеваний.

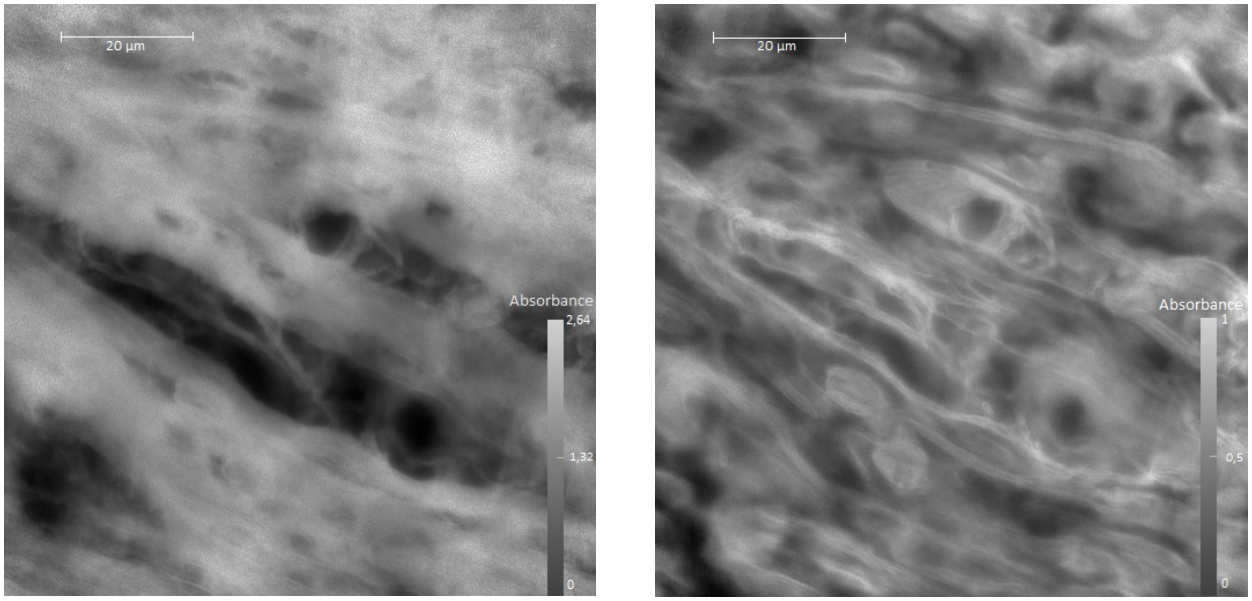


Рис. 1. Распределение оптической плотности в тонком срезе пораженной раковой опухолью почки человека, измеренное с помощью УФ микроскопа на длинах волн 235 и 400 нм

УДК авторами не указан

Идентификация каротиноидов с иононовыми кольцами в составе концевых групп молекул методом спектроскопии комбинационного рассеяния

***Д. Д. Васимов*[1], *А. А. Ашихмин*[2], *М. А. Большаков*[2], *В. С. Новиков*[1]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2] Пущинский научный центр биологических исследований РАН

Каротиноиды — натуральные органические пигменты, участвующие в различных биохимичесикх процессах многих живых организмов [1]. Они выполняют важные для здоровья людей функции, выступая в роли антиоксидантов и провитаминов, а также обладая антиканцерогенными, геропротекторными и иммуностимулирующими качествами [2]. При этом свойства каротиноидов могут существенно различаться в зависимости от их химической структуры и изомерного состава [3]. Каротиноиды не вырабатываются человеческим организмом, он получает их через пищу, биологически активные добавки и средства наружного применения. Таким образом, определение химического и изомерного состава каротиноидов является чрезвычайно востребованным при анализе пищевых и лекарственных продуктов.

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) света является неразрушающим и высокоинформативным методом анализа молекулярных веществ [4]. При помощи спектроскопии КР можно детектировать даже малые концентрации каротиноидов в том числе в биологических объектах благодаря эффекту резонансного усиления интенсивности линий в спектрах КР [5].

Целью нашей работы является выявление новых особенностей в спектрах КР каротиноидов, позволяющих определить их химический и изомерный состав. Данный доклад сконцентрирован на особенностях, связанных с наличием иононовых колец в структуре концевых групп молекул каротиноидов.

Для исследования данных особенностей были зарегистрированы спектры КР спириллоксантина, ликопина и нейроспорина, не имеющих в структуре своих молекул иононовых колец, а также β-каротина, имеющего два β-иононовых кольца в составе концевых групп молекул, и лютеина, имеющего одно β-иононовое и одно ε-иононовое кольца в качестве концевых групп молекул, структура молекулы лютеина представлена на рис. 1. Спектры были записаны на КР-микроскопе Senterra II (Brucker, США) с использованием двух длин волн возбуждающего излучения 532 и 785 нм со спектральным разрешением 1,5 и 4 $см^{-1}$. Образцы каротиноидов были выделены из бактерий и коммерческих препаратов методом высокоэффективной жидкостной хроматографии [6].

В качестве дополнительного метода для анализа использовались квантово-химические расчеты структур и спектров КР молекул каротиноидов методом функционала плотности. Были произведены оптимизация геометрий структур и расчет спектров КР молекул каротиноидов, которые были нами исследованы экспериментально, а также γ-каротина и астаксантина, содержащих одно и два β-иононовых кольца в составе концевых групп своих молекул, соответственно, а также s-*цис*- и s-*транс*-изомеров молекул β-каротина. Расчеты проводили в некоммерческой программе «Природа» с использованием функционала OLYP и расширенного базиса гауссова типа 4z [7].

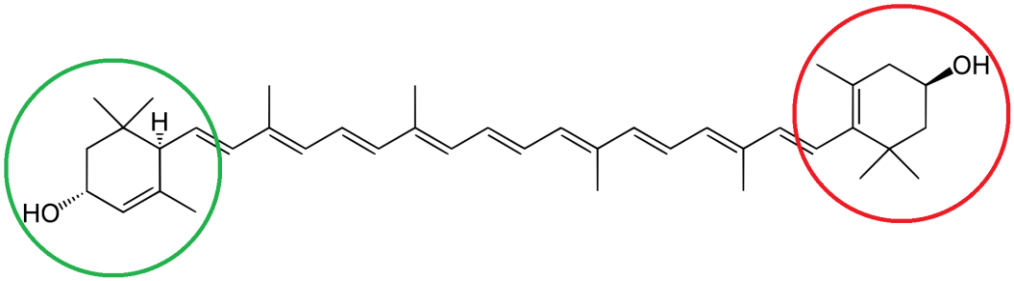


Рис. 1. Структурная формула молекулы лютеина. Зеленым выделена концевая группа с ε-иононовым кольцом, красным — с β-иононовым кольцом

На рис. 2 приведены рассчитанные спектры КР исследуемых каротиноидов. При анализе представленного в работе набора каротиноидов было обнаружено, что положение наиболее интенсивных линий в спектрах КР каротиноидов в диапазоне 1265–1290 см$^{-1}$ является индикатором наличия иононовых колец в структуре концевых групп молекул. Для каротиноидов, не содержащих иононовых колец в составе концевых групп молекул, положение наиболее интенсивной линии находится в области 1282–1289 см$^{-1}$, а для каротиноидов, содержащих иононовые кольца в составе концевых групп молекул, оно смещено в сторону меньших частот и находится в области 1266–1270 см$^{-1}$.

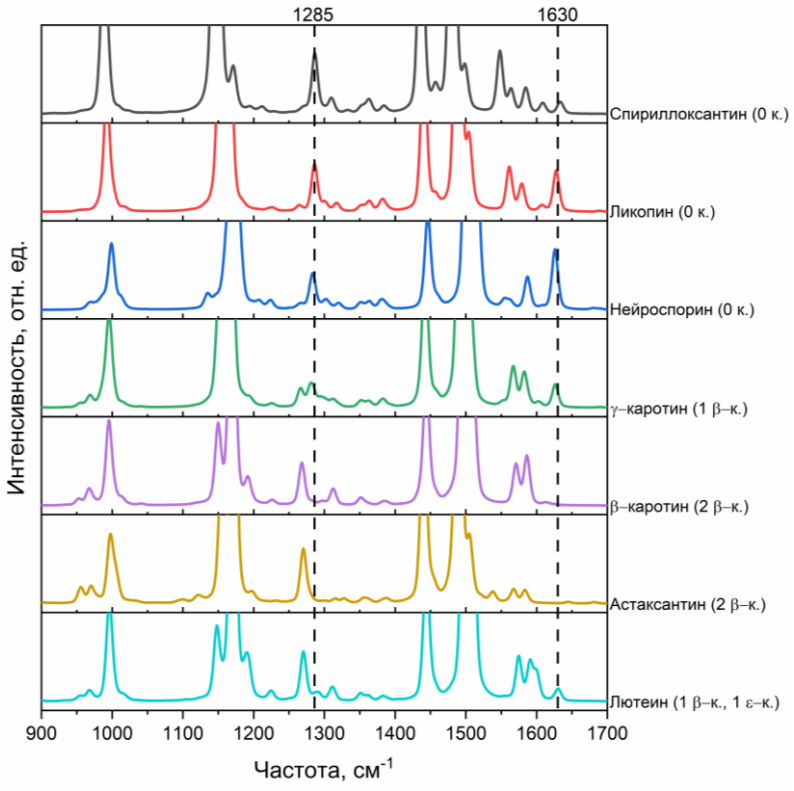


Рис. 2. Рассчитанные спектры КР молекул каротиноидов с иононовыми кольцами и без них. Рядом с названием каротиноида в скобках указано количество β-иононовых (β-к.) и ε-иононовых колец (ε-к.) в структуре его молекулы, или указано отсутствие колец (0 к.)

Кроме того, было обнаружено, что дополнительным маркером определения β-иононовых колец в структуре концевых групп молекул каротиноидов является отсутствие линии около 1630 см$^{-1}$. Для

каротиноидов с β-иононовыми кольцами в качестве обеих концевых групп молекул эта линия отсутствует в спектрах КР.

Дополнительно для исследования влияния наличия иононовых колец в составе концевых групп молекул каротиноидов на спектры КР были рассчитаны структуры и спектры молекул s-*транс*-β-каротина, 1-s-*цис*-β-каротина и 2-s-*цис*-β-каротина, которые отличаются поворотом β-иононовых колец. При анализе спектров КР были установлены различия в положениях наиболее интенсивных линий (около 1000, 1150 и 1520 $см^{-1}$) и других менее интенсивных линий для s-*цис*- и s-*транс*-изомеров.

Результаты данной работы позволяют отличать по спектрам КР каротиноиды с различными структурными особенностями, а именно устанавливать по спектрам наличие иононовых колец в концевых группах молекул, а также определять изомеризацию, связанную с поворотом иононовых колец.

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов.

Литература

1. *Thomas D. B*. [et al.]. Non-destructive descriptions of carotenoids in feathers using Raman spectroscopy // Anal. Methods. 2014. V. 6(5). P. 1301–1308. DOI: 10.1039/C3AY41870G.
2. *Johnson E. J*. The Role of Carotenoids in Human Health // Nutr. Clin. Care. 2002. V. 5(2). P. 56–65. DOI: 10.1046/j.1523-5408.2002.00004.x.
3. *Wang H*. [et al.]. Antioxidant, anticancer activity and molecular docking study of lycopene with different ratios of Z-isomers // Curr. Res. Food Sci. 2023. V. 6: 100455. DOI: 10.1016/j.crfs.2023.100455.
4. *Novikov V. S*. [et al.]. Raman Scattering Study of Natural and Synthetic Compounds Containing Polyene Chains Dokl. Phys. 2021. V. 66(9). P. 257–263. DOI: 10.1134/S1028335821090044.
5. *Darvin M. E*. [et al.]. Noninvasive selective detection of lycopene and β-carotene in human skin using Raman spectroscopy // Laser Phys. 2004. V. 14(2). P. 231–233.
6. *Васимов Д. Д*. [и др.]. Новые маркеры для определения химического и изомерного состава каротиноидов методом спектроскопии комбинационного рассеяния // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2023. Т. 513. С. 10–17. DOI: 10.31857/S2686740023060147.
7. *Laikov D. N., Ustynyuk Y. A.* PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // Russ. Chem. Bull. 2005. V. 54(3). P. 820–826. DOI: 10.1007/s11172-005-0329-x.

УДК 538.958

Сцинтилляционные детекторы на основе оксидов со структурой перовскитов

***И. А. Захарчук*[1,2], *А. С. Селюков*[1,2,3,4], *М. И. Данилкин*[2,5], *Б. И. Заднепровский*[2], *С. А. Амброзевич*[1,2,5], *М. Э. Гехт*[1,3]**

[1]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[3]ВИНИТИ РАН
[4]Московский политехнический университет
[5]Московский физико-технический институт

На протяжении длительного времени в качестве твердых электролитов, материала для изготовления теплоизолирующих покрытий используются и в качестве катализатора при производстве биодизеля используются цераты щелочно-земельных материалов [1]. Оптические и люминесцентные свойства цератов стронция ($SrCeO_3$, Sr_2CeO_4), бария ($BaCeO3$, Ba_2CeO_4) и кальция ($CaCeO_3$, Ca_2CeO_4) изучены слабо, либо информация отсутствует вовсе [2].

Выдвинуто предположение о возможности создания на основе вышеперечисленных соединений сцинтилляционных детекторов ионизирующего излучения. Были получены спектры возбуждения люминесценции, фотолюминесценции и катодолюминесценции для всех исследуемых образцов. Возбуждение катодолюминесценции осуществлялось при помощи импульсного портативного ускорителя электронов РАДАН-ЭКСПЕРТ (рис. 1) [3].

Доза облучения для одного образца составляла около 1 $кГр/см^2$. Регистрация спектров осуществлялась при помощи спектрометра Ocean Optics Maya 200 Pro с рабочим диапазоном 300–900 нм [4]. Возбуждение фотолюминесценции и фотолюминесценция регистрировались при помощи спектрометра СДЛ-1 с ФЭУ Hammamatsu H6240-01 с рабочим диапазоном 300–850 нм. Измерения проводились при пониженных температурах (85К), использовался безмасляный высоковакуумный откачный пост HiCube

80 Eco. Кинетика катодолюминесценции регистрировалась с помощью осциллографа TDS 3045B Tektronix через монохроматор МДР-3 с ФЭУ 100. Спектры фотолюминесценции измерялись при длине волны возбуждения 325 нм, в области 420–680 нм для каждого из образцов наблюдалась широкая полоса люминесценции.

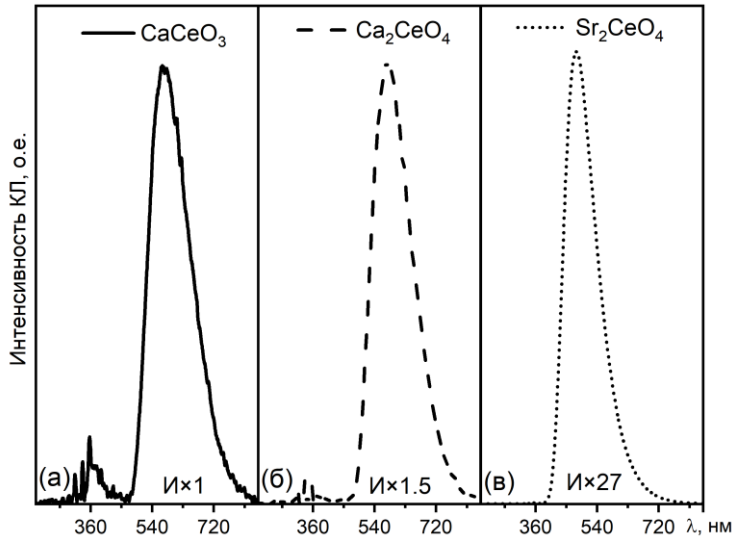


Рис. 6. Спектры катодолюминесценции для образцов $CaCeO_3$ (*а*), Ca_2CeO_4 (*б*) и Sr_2CeO_4 (*в*)

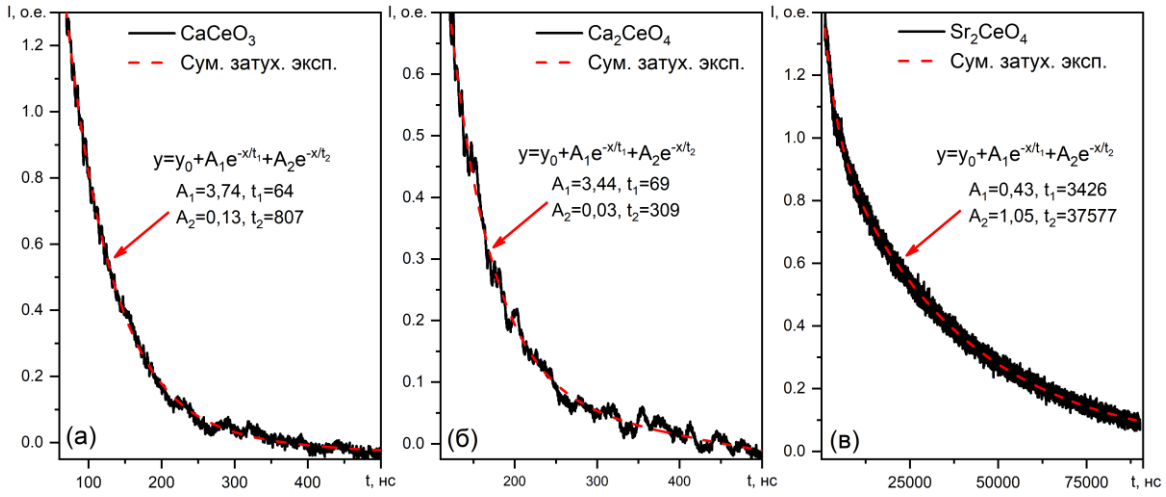


Рис. 7. Кинетика затухания люминесценции для образцов $CaCeO_3$ (*а*), Ca_2CeO_4 (*б*) и Sr_2CeO_4 (*в*)

Самая высокая интенсивность как фотолюминесценции, так и катодолюминесценции была зарегистрирована у образца Sr_2CeO_4, однако времена затухания люминесценции оказались достаточно большими и равнялись сотням микросекунд (рис. 2). Менее интенсивные образцы цератов кальция разных составов показали значительно меньшие времена затухания в пределах десятков наносекунд. Такие времена можно назвать рабочими, однако следует провести доработку методологии синтеза и отладку стехиометрии с целью получения более быстрых показателей времен затухания люминесценции.

Литература

1. *Hibino T.* [et al]. Proton conduction at the surface of Y-doped BaCeO3 // The Journal of Physical Chemistry. 2021. V. 105.46. P. 11399–11401.
2. *Yadav D.* [et al]. Study of structural, electrical, and photoluminescent properties of $SrCeO_3$ and Sr_2CeO_4 // J ournal of Advanced Ceramics. 2019. V. 8. P. 377–388.
3. *Zakharchuk I. A.* [et al]. Luminescent dosimetric materials based on magnesium tetraborate for proton beam metrology // ANRI (Apparatura i novosti radiacionnyh izmerenij). 2023. V. 3(114). P. 45–55.
4. *Zakharchuk I. A.* [et al]. Optical Erasing of Dose Information in TLD-580N Thermoluminescent Detectors // Vestnik natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta “MIFI”. 2022. V. 11(2). P. 164–169.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Люминесцентная термометрия на кристаллах с редкоземельными ионами

***М. Диаб*[1,2], *К. Н. Болдырев*[2], *М. Н. Попова*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт спектроскопии РАН

Кристаллы с редкоземельными элементами обладают разнообразными функциональными возможностями. Они применяются в лазерных технологиях, в создании люминесцентных материалов, в технологиях дисплеев, в оптическом охлаждении объектов и во многом другом. Одно из увлекательных применений — дистанционное измерение температуры объектов с использованием люминесцентной термометрии [1].

В данном исследовании спектры фотолюминесценции кристаллов ($K_2YF_5:Er^{3+}$, $LiYF_4:Er^{3+}$, $LiYF_4:Ho^{3+}$) регистрировались в диапазоне температур 2.5 — 90K с помощью Фурье спектрометра Bruker IFS 125HR с разрешением до 0.01cm^{-1}, в спектральной области переходов $^4I_{11/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ для ионов Er^{3+} [2,3] и переходов $^5F_5 \rightarrow {}^5I_6$ для ионов Ho^{3+} [4]. Для охлаждения кристаллов использовался криостат с замкнутым гелиевым циклом Sumitomo-SRP096. Люминесценция кристаллов возбуждалась диодными лазерами с длинами волн λ_{ex}=808nm (для возбуждения Er^{3+}) и λ_{ex}=638nm (для возбуждения Ho^{3+}).

В результате анализа спектров построены температурные зависимости отношений интегральных интенсивностей линий (*LIR* — line intensity ratio) $I_2(T)/I_1(T)$, которые сопоставляются с распределением Больцмана по формулам:

$$\frac{n_2(T)}{n_1(T)} = \frac{g_2}{g_1} e^{(-\Delta E/kT)}, \qquad (1)$$

$$LIR(T) \equiv \frac{I_2(T)}{I_1(T)} = \frac{W_2 n_2(T)}{W_1 n_1(T)} = C\, e^{(-\Delta E/kT)}, \qquad (2)$$

где W_m (m = 1, 2) — вероятность перехода с m-го уровня, обладающего энергией E_m; g_m — кратность вырождения m-го уровня; $C \equiv W_2 g_2 / W_1 g_1$; $\Delta E = E_2 - E_1$ [5]. Формула (2) справедлива, если (i) выполняется больцмановское распределение и (ii) вероятности W_m не зависят от температуры. Оба эти условия не всегда выполняются [5], поэтому при построении больцмановского ратиометрического термометра необходима проверка.

На рис. 1*a*, *b* и рис. 2 показано хорошее согласие экспериментальных результатов для отношений интенсивностей линий с больцмановским распределением населенностей уровней в кристаллах $K_2YF_5:Er^{3+}$ [6], $LiYF_4:Er^{3+}$ и $LiYF_4:Ho^{3+}$, соответственно. Схемы уровней и используемые обозначения приведены на вставках, а некоторые параметры предложенных люминесцентных термометров — в табл. 1.

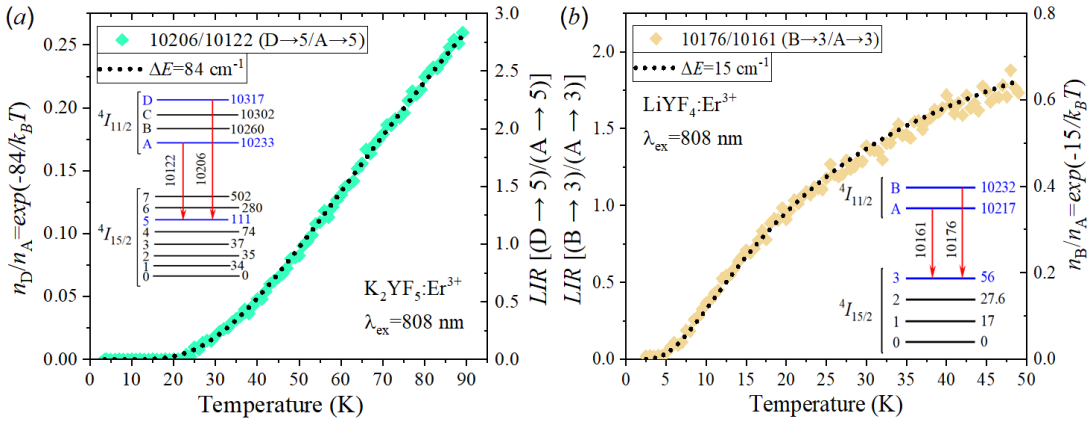


Рис. 1. Температурные зависимости отношений интегральных интенсивностей (*LIR*) линий (символы): *a* — 10206 см$^{-1}$ [переход D($^4I_{11/2}$) → 5($^4I_{15/2}$)] и 10122 см$^{-1}$ [переход A($^4I_{11/2}$) → 5($^4I_{15/2}$)] в кристалле $K_2YF_5:Er^{3+}$и (*b*) 10176 см$^{-1}$ [переход B($^4I_{11/2}$) → 3($^4I_{15/2}$)] и 10161 см$^{-1}$ [переход A ($^4I_{11/2}$) → 3($^4I_{15/2}$)] в кристалле $LiYF_4:Er^{3+}$ и населенностей уровней (*a*) D и A, разделенных интервалом 84 см$^{-1}$; *b* — B и A, разделенных интервалом 15 см$^{-1}$, в предположении больцмановского распределения (пунктирные линии)

Исследованные кристаллы имеют значительный потенциал для измерения криогенных температур методом люминесцентной больцмановской ратиометрической термометрии.

Т а б л и ц а 1. Выбранные пары линий люминесценции, соответствующие разностям энергий ΔE между начальными уровнями переходов и температуры T_m, где максимальна абсолютная чувствительность $S_a = d(LIR)/dT$

Кристалл	I_2 (T)	I_1 (T)	ΔE (cm^{-1})	T_m (K)
$K_2YF_5:Er^{3+}$	10206 cm^{-1}, D→5	10122 cm^{-1}, A→5	E_D-E_A=84	60.4
$LiYF_4:Er^{3+}$	10176 cm^{-1}, B→3	10161 cm^{-1}, A→3	E_B-E_A=15	10.8
$LiYF_4:Ho^{3+}$	6824.95 cm^{-1}, C→4	6792 cm^{-1}, A→5	E_C-E_A=23.3	16.8

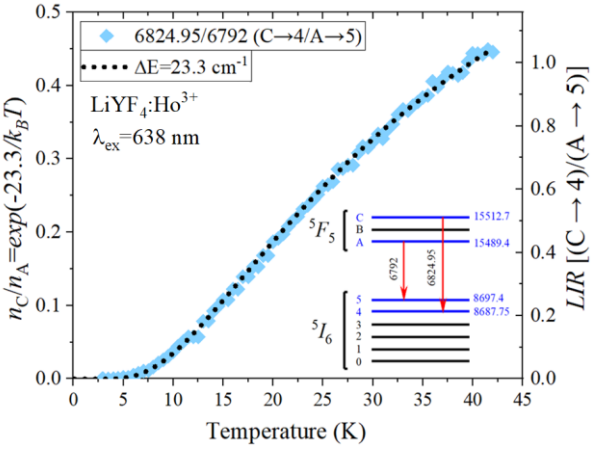


Рис. 2. Температурные зависимости отношений интегральных интенсивностей (*LIR*) линий 6824.95 cm^{-1} [переход $C(^5F_5) \rightarrow 4(^5I_6)$] и 6792 cm^{-1} [переход $A(^5F_5) \rightarrow 5(^5I_6)$] в кристалле $LiYF_4:Ho^{3+}$ (символы) и населенностей уровней C и A, разделенных интервалом 23.3 cm^{-1}, в предположении больцмановского распределения (пунктирные линии)

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00047).

Литература

1. *Brites C. D. S.* [et al.]. Lanthanide-Based Thermometers: At the Cutting-Edge of Luminescence Thermometry // Adv. Optical Mater. 2019. V. 7: 801239.
2. *Peale R. E.* [et al.]. Spectroscopy of Er^{3+} in K_2YF_5 // Advanced Solid State Lasers. 1997. V.10. P. 462–466.
3. *Popova M. N.* [et al.]. Experimental and theoretical study of the crystal-field levels and hyperfine and electron-phonon interactions in $LiYF_4$: Er^{3+} // Physical Review B. 2000. V. 61(11): 7421.
4. *Boldyrev K. N.* [et al.]. Observation of the hyperfine structure and anticrossings of hyperfine levels in the luminescence spectra of $LiYF_4$: Ho^{3+} // Light: Science & Applications. 2022. V. 11: 245.
5. *Suta M.* [et al.]. A theoretical framework for ratiometric single ion luminescent thermometers—thermodynamic and kinetic guidelines for optimized performance // Advanced Theory and Simulations. 2020. V.3(12):2000176.
6. *Boldyrev K. N.* [et al.]. Luminescent cryothermometer based on $K_2YF_5:Er^{3+}$ // Optics and spectroscopy. 2023. 131(10).

УДК 546.27

Синтез сильнолегированных бором наноалмазов пиролизом 9-борабицикло[3,3,1]нонан димера под давлением

***К. М. Кондрина*[1,2], *С. Г. Ляпин*[1], *А. А. Ширяев*[3], *Ю. В. Григорьев*[4], *Н. М. Щелкачев*[1], *Е. А. Екимов*[1]**

[1]Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН
[4]Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН

Благодаря уникальному комплексу физико-химических свойств, легированные бором наноалмазы (BND) находят применение в качестве наполнителя «чернил» струйной печати электрохимических электродов, в виде коллоидного раствора в суперконденсаторах, как нагревательный элемент в раковой термотерапии, в качестве затравок при получении проводящих CVD покрытий без нарушения электрического контакта с подложкой и многих других приложениях. Несмотря на потенциальную востребованность в легированных бором single-digit наноалмазах (SD-BND), практическое применение BND ограничено наноалмазами с размером от нескольких десятков нанометров, получаемых дроблением [1].

Возможность массового синтеза B-SDND была недавно продемонстрирована в условиях высоких статических давлений при разложении насыщенного гетероуглеводорода $C_{16}H_{30}B_2$ (9BBN), но свойства B-SDND остались практически неизученным [2]. Непонятым оказался и процесс непосредственной трансформации 9BBN в наноалмаз.

В настоящей работе изучены особенности образования и легирования наноалмазов в процессе пиролиза гетероциклического соединения 9-борабицикло[3,3,1]нонан димера, $C_{16}H_{30}B_2$, при давлении 8-9 ГПа и температурах до 1600 К.

Теоретические оценки предсказывают выталкивание атомов бора из объема на поверхность наночастиц алмаз [3]. В противоположность пессимистическим прогнозам, мы, впервые, с использованием метода рамановской спектроскопии демонстрируем вхождение бора в решетку наноалмазов размером 2,1 и 4,2 нм. На спектрах присутствуют характерные для сильно легированного бором алмаза особенности на 500, 1000, 1220, 1313 $см^{-1}$ (рис. 1*а*). Анализ рамановских спектров с использованием методики, предложенной *Mortet V.* позволяет сделать оценку концентрации бора в наноалмазах на уровне 10^{21} $см^{-3}$, что соответствует сильному легированию [4]. В отличие от обычных наноалмазов, эффект локализации фононов, связанный с размерами нанокристаллов, не обнаруживается для BND. Отсутствие размерного эффекта в рамановском рассеянии света наноалмазами может быть связано с ограничением длины когерентности фононов примесными атомами бора [5].

Результаты экспериментов указывают на зарождение наноалмазов непосредственно при разложении прекурсора в диапазоне температур 770–830 К, и позволяют выделить несколько стадий процесса фазовых превращений в зависимости от температуры: i) полимеризацию с образованием алмазоподобных кластеров и насыщенного бором нанографита, ii) рост алмазных кластеров в нанографите и iii) перекристаллизацию нанофазной смеси во флюидной ростовой среде (рис. 1*б*).

Предложен механизм нуклеации наноалмазов при температуре 770–830 К, предполагающий сшивку молекул B–C-связями с сохранением исходной sp^3-гибридизации молекул (рис. 1*в*). Выполнен расчет одного из вариантов реакции полимеризации с помощью программы Gaussian. Образующийся в ходе реакции кластер может служить зародышем роста алмаза [6].

Исследована кинетика роста кристаллов при температуре 1270 К, показано каталитическое влияние бора, способствующее перекристаллизации нанографита в алмаз с сопутствующим образованием карбида бора.

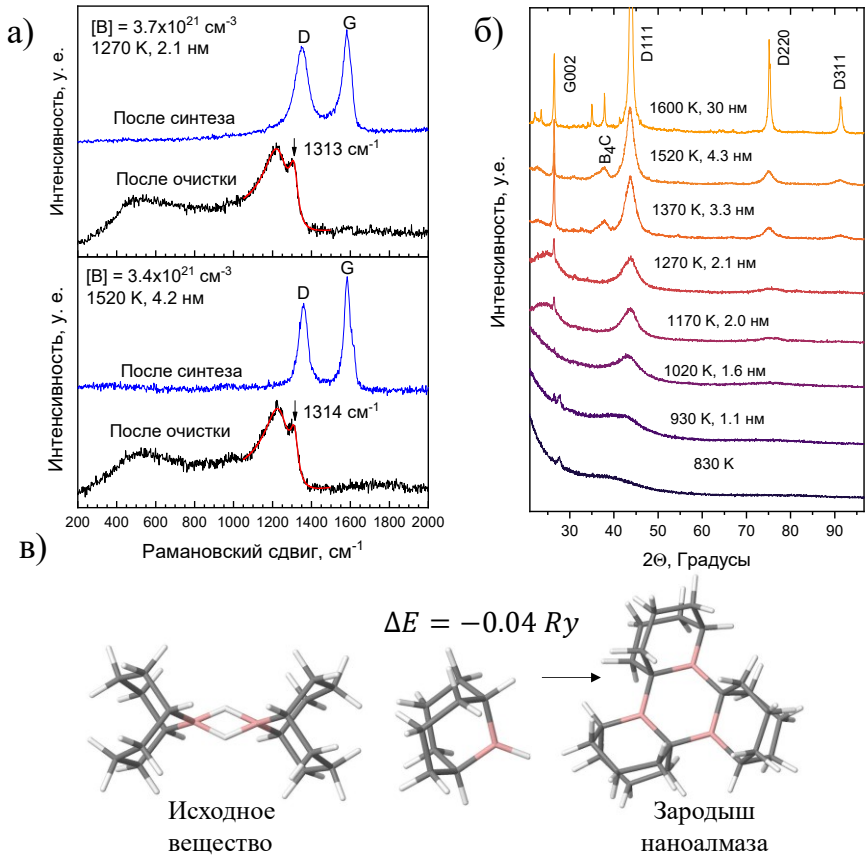


Рис. 1. Результаты: *а* — рамановский спектр легированных алмазов; *б* — рентгеновские спектры фазовых превращений; *в* — пример реакции полимеризации с образованием зародыша наноалмаза

Литература

1. *Кондрина К. М.* [и др.]. Особенности образования сильнолегированных бором наноалмазов в процессе пиролиза 9-борабицикло[3,3,1]нонан димера под давлением // Неорганические материалы. 2024. Статья принята к публикации.
2. *Ekimov E. A.* [et al.]. High-Pressure Synthesis of Boron-Doped Ultrasmall Diamonds from an Organic Compound // Adv. Mater. 2015. V. 27(37). P. 5518-5522. DOI: 10.1002/adma.201502672.
3. *Barnard A. S., Sternberg M.* Substitutional boron in nanodiamond, bucky-diamond, and nanocrystalline diamond grain boundaries // J. Phys. Chem. B. 2006. V. 110(39). P. 19307-19314. DOI: 10.1021/jp0634252.
4. *Mortet V.* [et al.]. Determination of atomic boron concentration in heavily boron-doped diamond by Raman spectroscopy // Diamond Relat. Mater. 2019. V. 93. P. 54-58. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.01.02.
5. *Khomich A. A., Khmelnitsky R. A., Khomich A. V.* Probing the nanostructure of neutron-irradiated diamond using Raman spectroscopy // Nanomater. 2020. V. 10(6): 1166. DOI: 10.3390/nano10061166.
6. *Gebbie M. A.* [et al.]. Experimental measurement of the diamond nucleation landscape reveals classical and nonclassical features // Proc. Nat. Ac. Sci. 2018. V. 115(33). P. 8284–8289. DOI: 10.1073/pnas.1803654115.

УДК 535-32

Исследование спектра вакуумного ультрафиолета экспериментального источника излучения на основе лазерной плазмы лития

***Л. В. Степанов*[1,2], *Н. Д. Матюхин*[2,3], *В. М. Губарев*[2,3], *М. С. Кривокорытов*[2]**

[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Институт спектроскопии РАН
[3]Московский физико-технический институт

Фотолитография является одним из ключевых этапов в процессе производства полупроводниковых структур, в том числе компьютерных чипов нанометрового масштаба. Поскольку размер производимых структур прямо пропорционален рабочей длине волны, EUV литография с длиной волны 13.5 нм является наиболее перспективной на данный момент технологией.

Одной из важных задач, возникающих в процессе работы фотолитографических машин, является инспекция формирующих изображение масок [1]. Их инспекцию необходимо проводить излучением с той же длиной волны, что и рабочее [2]. Поскольку традиционная оптика в диапазоне экстремального ультрафиолета не эффективна из-за высокого коэффициента поглощения, в оптических схемах инспекции используются либо многослойные интерференционные зеркала, либо зонные пластинки [3]. Среди используемых источников наибольшее распространение получил источник на лазерной плазме олова, однако его спектр в области 13,5 нм не монохроматичен, а представляет из себя массив переналожившихся спектральных линий, что не позволяет использовать его с зонными пластинками из-за хроматических аберраций. Именно поэтому в качестве источника диагностического излучения предполагается использовать лазерную плазму лития — для водородоподобного лития линия лайман-альфа имеет длину волны 13,5 нм. Поскольку качество изображения, даваемого зонной пластинкой, определяется шириной линии, необходимо измерить ширину линии разрабатываемого источника.

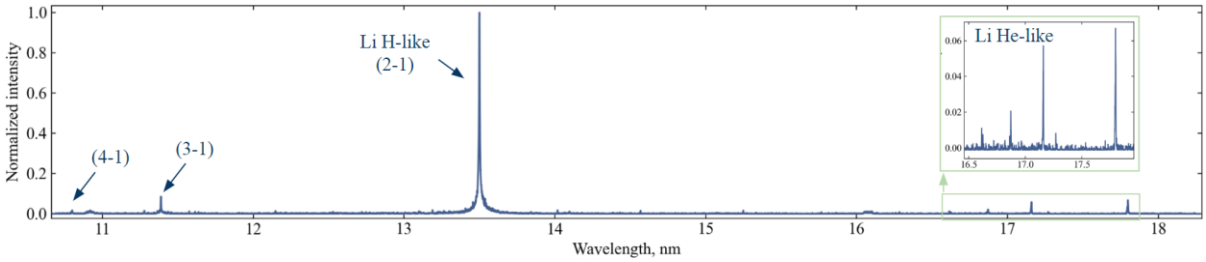


Рис. 1. Спектр лития, полученный в ходе эксперимента

В данной работе изучается излучение лазерной плазмы водородо- и гелиеподобного лития в диапазоне 9–20 нм, получаемое в источнике, разработанном в лаборатории атомной спектроскопии. Для этого был использован спектрометр скользящего падения высокого разрешения ДФС-26. Для регистрации спектров была применена запоминающая фосфоресцирующая пленка активированная кристаллами BaFBr : Eu [4]. С помощью данной системы получены спектры водородо- и гелиеподобного лития, показанные на рис. 1.

Ширина линии лайман-альфа водородоподобного лития $\lambda/\Delta\lambda$ оказалась равной 2000, что соответствует требованиям на монохроматичность современных зонных пластинок.

Литература

1. *Juschkin L., Wack D*. Source performance metrics for EUV mask inspection // J. Micro/Nanopatterning Mater. Metrol. 2022. V. 21(2). DOI: 10.1117/1.JMM.21.2.021204.
2. *Seki K.* [et al.]. Shedding light on EUV mask inspection // Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng. 2012. V.8441: 14. DOI: 10.1117/12.976059.
3. *Goldberg K. A.* [et al.] An EUV Fresnel zoneplate mask-imaging microscope for lithography generations reaching 8 nm // Proc. of SPIE Int. Soc. Opt. Eng. 2011. V. 7969: 34. DOI: 10.1117/12.881651.
4. *Nave G.* [et al.] Use of phosphor image plates for measuring intensities in vacuum ultraviolet spectra // Rev. Sci. Instrum. 2011. V. 82(1): 013107. DOI: 10.1063/1.3529879.

УДК 535.231.1, 535-32, 539.184.3

Плазменно-пучковый режим разряда низкоиндуктивной вакуумной искры

***Н. Д. Матюхин*[1,3], *Л. В. Степанов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[3]Институт спектроскопии РАН

Настоящая работа выполнена в рамках исследований по разработке источников излучения в диапазоне экстремального ультрафиолета (ЭУФ-диапазон, проводящихся в институте спектроскопии РАН.

Востребованность источников излучения в экстремальном ультрафиолетовом диапазоне в связи с проблемами нанолитографии [1] делает актуальным более подробное изучение излучения вакуумной искры в этом диапазоне длин волн.

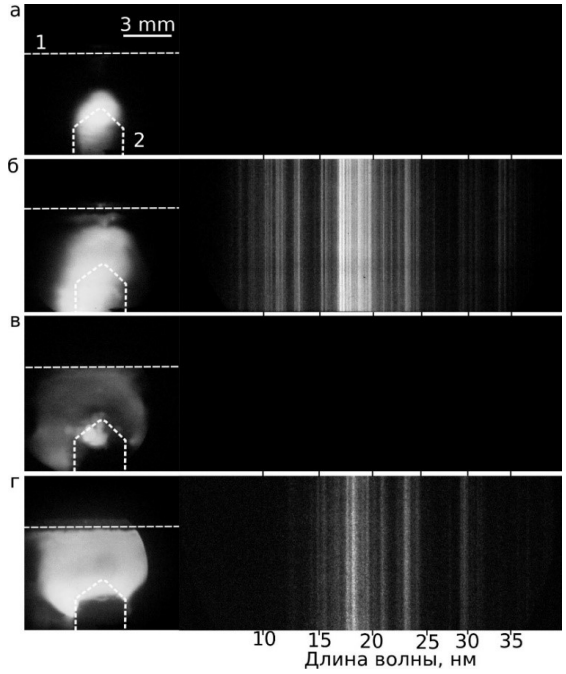


Рис. 1. На обскурограммах цифрами показаны положения катода (1) и анода (2). Результаты соответствуют следующим задержкам стробирующего импульса МКП относительно момента начала триггерного импульса: *а* — 138 нс; *б* — 238 нс; *в* — 368 нс; *г* — 568 нс

Основной экспериментальной методикой данных исследований является одновременная регистрация с помощью МКП детекторов пространственной структуры и спектрального состава ЭУФ излучения плазмы разряда 50-килоамперной вакуумной искры с кадровым временным разрешением 20 нс. Обнаружено появление на первых 200–300 нс разряда ЭУФ излучения плазмы материала анода, которое гаснет и вновь появляется через ~100 нс на стадии разогрева и пинчевания плазмы. Спектральный состав плазмы

регистрировался с помощью спектрометра скользящего падения со смещенной щелью [2], позволяющий получать фокусировку спектра перпендикулярно лучу зрения. Одновременно со снятием спектрограммы разряда производилась регистрация пространственной структуры плазменного разряда с помощью камеры-обскуры. Совместный анализ спектральной и пространственной структур позволил выделить 4 стадии разряда с воспроизводящейся общей структурой светящейся плазмы и характерным спектром. На рис. 1 представлены спектрограммы и обскурограммы плазменного разряда в выделенных стадиях.

Центральным моментом полученных результатов является исчезновение ЭУФ спектров разряда на 3 стадии. До момента инициации разряда к промежутку анод — катод приложено полное зарядное напряжение основной емкости. Развитие электрического пробоя в разрядном промежутке сопровождается падением этого напряжения. Из полученных в ходе эксперимента данных следует, что в течение первых 300 нс (время, соответствующее стадиям 1 и 2) к разрядному промежутку приложено напряжение порядка нескольких кВ. Из-за наличия напряжения на стадии 2, возможно возникновение эффекта «убегающих электронов» [3]. Пространственная структура плазмы на временах 200–300 нс еще не образует плазменного столбика, соединяющего катод и анод. Основными явлениями на стадии 2 является испарение поверхности анода ускоренными электронами и ионизация возникающих паров материала анода. Сделанные оценки критического поля подтверждают возможность такого механизма.

Отмеченное явление может быть использовано для создания источников ЭУФ излучения, имеющих практическое применение. В случае использования анода из олова на 2 стадии разряда можно наблюдать массив переходов в области 13,5 нм, который находит применение в технологии ЭУФ литографии [4]. Представляется интересным проведение детального изучение процесса развития плазмы на начальной стадии развития разряда, что могло бы прояснить оптимальные условия для генерации излучения в области 13,5 нм.

Литература

1. *Banine V., Koshelev K., Swinkels G.* Physical processes in EUV sources for microlithography // Appl. Phys. 2011. V. 44(25): 253001. DOI: 10.1088/0022-3727/44/25/253001.
2. *Antsiferov P., Dorokhin L., Krainov P.* Grazing incidence off Rowland spectrometer with shifted slit // Rev. Sci. Instr. 2016 V. 87: 1.4945654. DOI: 10.1063/1.4945654.
3. *Dricer H.* Electron and Ion Runaway in a Fully Ionized Gas // Phys. Rev. 1958 V. 115(2). P. 238–249. DOI: 10.1103/physrev.117.329.
4. *Рябцев А. Н., Чурилов С. С.* Атомно-ионная спектроскопия для астрофизики и нанотехнологий // УФН. 2009. Т. 139. № 3. С. 305–309. DOI: 10.3367/UFNr.0179.200903j.030.

УДК 543.42

Картирование молекулярных потенциалов с помощью спектроскопии накачки-зондирования

***С. Н. Блинов*[1], *В. В. Кимберг*[1], *Ф. Х. Гельмуханов*[1,2], *С. П. Полютов*[1]**

[1]МНИЦ спектроскопии и квантовой химии IRC SQC, Сибирский федеральный университет
[2]KTH Royal Institute of Technology

Сверхбыстрая спектроскопия накачки-зондирования — это чрезвычайно полезный инструмент для изучения динамики, где первый импульс (накачка) используется для запуска электронных или ядерных процессов, в то время как второй (зондирующий) импульс, поступающий с задержкой, проверяет реакцию системы в рамки абсорбционной или фотоэмиссионной спектроскопии, позволяя проследить эволюцию системы в реальном времени. В последнее время значительное внимание уделяется рентгеновской спектроскопии с временным разрешением для исследования фотовозбужденных молекулярных процессов [1, 2]. С появлением установок XFEL и HHG наличие ультракоротких рентгеновских импульсов с перестраиваемой длиной волны в составе различных методов накачки-зондирования делает возможным прямое отображение неадиабатической ядерной динамики.

Мы рассматриваем фиксированную в пространстве молекулу NO как исследовательский пример [3], поскольку она была тщательно рассмотрена в недавних экспериментальных [4] и теоретических [5, 6] исследованиях.

Поскольку равновесное межъядерное расстояние катиона существенно отличается от расстояния нейтральной молекулы, ионизация запускает динамику колебательного волнового пакета (VWP) в

катионе, которая изучается методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии с временным разрешением (TRXAS) с использованием коротких задерживаемых во времени рентгеновских импульсов.

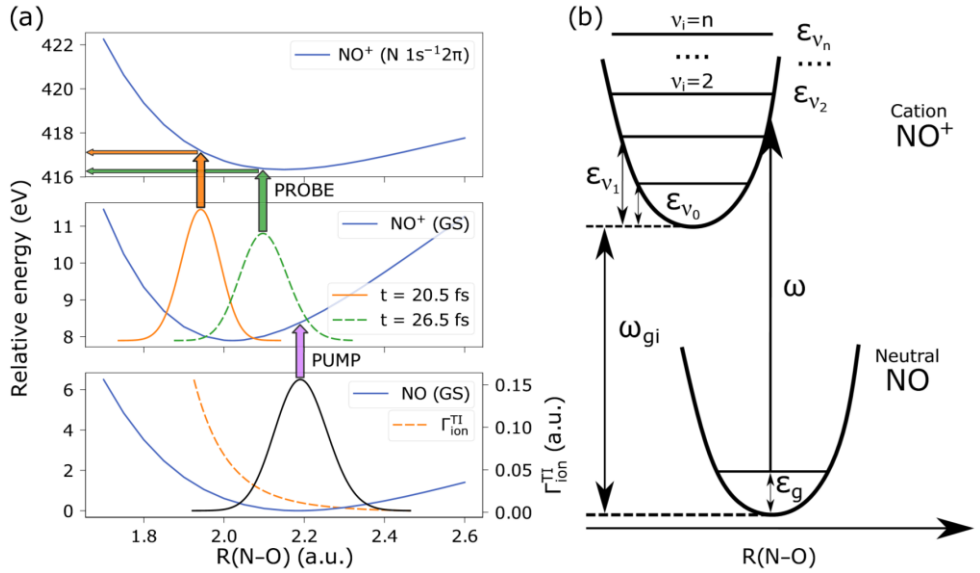


Рис. 1. Схема рентгеновской зондовой спектроскопии молекулы NO с ионизационной накачкой (*a*); показаны ab initio PEC и скорость ионизации $\Gamma_{\text{ion}}^{\text{TI}}(R)$, рассчитанные с использованием теории ADK; снимки VWP получены в результате численного моделирования. Колебательное возбуждение NO^+ при ионизации (*b*)

Когда молекула поглощает фотон (например, УФ или рентгеновский фотон) с энергией, превышающей энергию связи валентного электрона с высшей занятой молекулярной орбитали (HOMO), происходит однофотонная ионизация (OPI), также известная как линейная фотоионизация, поскольку скорость ионизации в этом случае пропорциональна интенсивности входящего света. В случае, когда энергия фотона меньше энергии связи электрона (например, ИК-фотон), ионизация может происходить в рамках процесса многофотонной ионизации (MPI). Когда интенсивность ИК-излучения становится достаточно высокой, доминирующим становится процесс туннельной ионизации (TI).

Настоящая схема накачки-зондирования (рис. 1), исследованная здесь теоретически, основана на полностью квантово-механическом описании VWP и соответствующем профиле TRXAS, использующем концепцию прямого и обратного времени распространения [5, 7, 8].

Мы исследуем влияние формы и длительности зондирующего рентгеновского импульса на профиль TRXAS и показываем, что траектория VWP точно отражается в TRXAS. Здесь и далее используются атомные единицы, если не указано иное.

Наше моделирование для различной длительности рентгеновского импульса (0,2–2,0 фс, полуширина на полувысоте HWHM) и гауссовой временной огибающей подтвердило, что профиль TRXAS достаточно хорошо отражает траекторию колебательного волнового пакета (рис. 2, слева), что делает метод накачки-зондирования очень полезным инструментом для извлечения параметров кривых молекулярной потенциальной энергии (PEC, ангармонизм и равновесная длина связи) с высокой точностью.

Измерение времени восстановления TRXAS (T_{rev}) позволяет вычислить ангармонизм как $x_e\omega_e = \pi/T_{\text{rev}}$. Используя простой аналитический вывод, можно показать, что

$$R_i = R_g + \sqrt{\frac{T_{\text{rev}}}{2\mu\pi}}\,\ln\left[1-\sqrt{1-(T_0/T)^2}\right], \qquad (1)$$

где μ — приведенная масса молекулы, R_g и R_i — равновесные расстояния основного и ионного состояний соответственно, T — период, соответствующий высокочастотным колебаниям TRXAS, T_0 — период, соответствующий гармонической частоте колебаний ионного состояния.

Отметим, что фундаментальную (гармоническую) частоту ω_e для основного ионного состояния можно точно найти, например, с помощью ИК-спектроскопии. В этом случае, используя значения T_{rev} и T, можно легко вычислить равновесное ионное расстояние R_i.

Наше численное моделирование для ряда вариаций исходного потенциала ab initio показало высокую чувствительность траектории TRXAS даже в случае незначительного отклонения потенциала, которое невозможно обнаружить (рис. 3) с помощью традиционной фотоэмиссионной спектроскопии (PES).

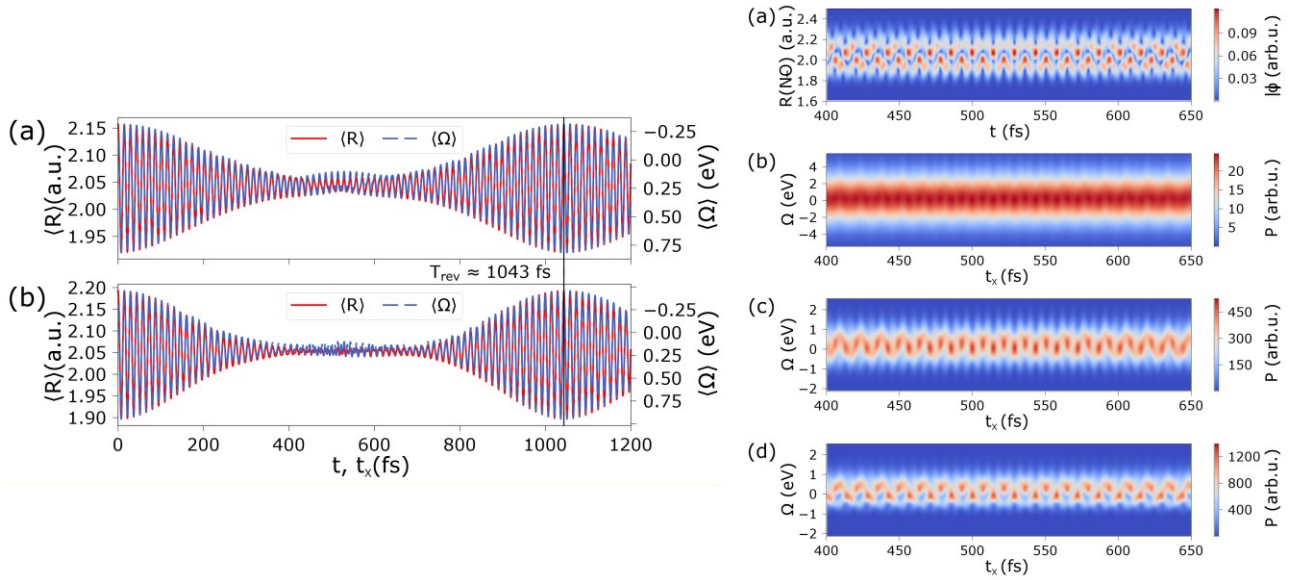


Рис. 2. Траектория VWP ⟨R⟩ основного состояния NO^+ в сравнении с центром тяжести TRXAS ⟨Ω⟩, как функция от времени для случаев TI (*a*) и OPI/MPI (b); τ_X = 0,2 фс (слева). Временная и R-зависимость модуля VWP |φ(t,R)| для режима TI (*a*); временная и энергетическая зависимость TRXAS для длительности зондирующего рентгеновского импульса τ_X = 0,2 (*b*), 1,0 (*c*) и 2,0 фс (*d*) (справа).

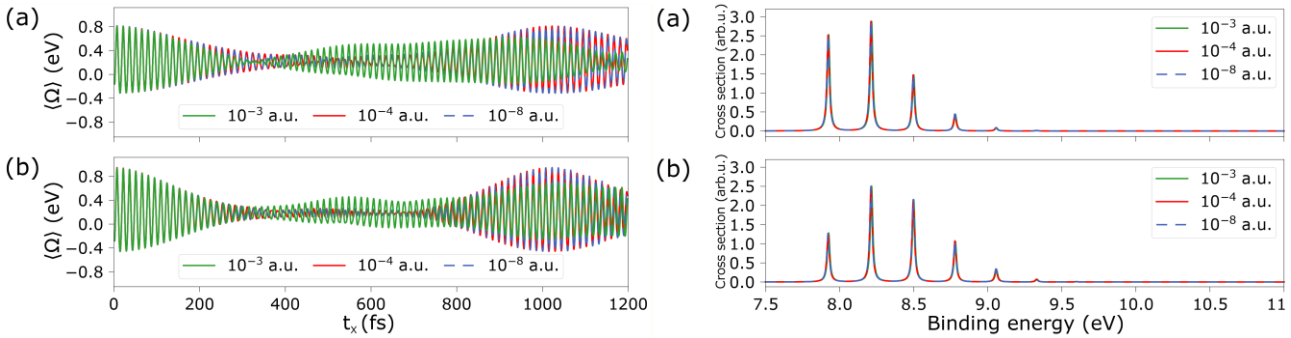


Рис. 3. TRXAS для динамики VWP, рассчитанный с помощью PEC основного состояния катиона, аппроксимированной с различной точностью: TI (a), OPI/MPI (b); τ_X = 0,2 фс (*слева*). Соответствующие теоретические PES со спектральным уширением 0,01 эВ (HWHM) (*справа*)

Мы также показали возможность полной реконструкции колебательного волнового пакета во времени и координатном пространстве по карте TRXAS (рис. 2, справа).

Подводя итог, в случае сверхбыстрого биения колебательного волнового пакета необходимо найти правильный баланс между временным и спектральным разрешением. Требуемая для этого длительность и когерентность импульса в настоящее время доступны в XFEL и источниках HHG рентгеновского излучения. Это дает положительную перспективу для экспериментального картирования ядерного волнового пакета в реальном времени и координатном пространстве. Рассматриваемый метод накачки-зондирования не ограничивается основным ионным состоянием и может быть распространен на валентно-нейтральные и ионные возбужденные состояния многоатомных молекул, когда применяется другой механизм накачки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSRZ-2023-0006).

Литература

1. *Gel'mukhanov F.* [et al.]. Dynamics of resonant x-ray and Auger scattering // Rev. Mod. Phys. 2021. V. 93(3): 035001.
2. *Varvarezos L.* [et al.]. Controlling Fragmentation of the Acetylene Cation in the Vacuum Ultraviolet via Transient Molecular Alignment // J. Phys. Chem. Lett. 2023. V. 14(1). P. 24–31.
3. *Blinov S. N.* [et al.]. Mapping molecular potentials using pump-probe spectroscopy of vibrational wave packets' revival // Phys. Rev. A. 2023. V. 108(1): 013104.
4. *Saito N.* [et al.]. Real-time observation of electronic, vibrational, and rotational dynamics in nitric oxide with attosecond soft x-ray pulses at 400 eV // Optica. 2019. V. 6(12). P. 1542–1546.

5. *Guimarães F. F.* [et al.]. Infrared–x-ray pump-probe spectroscopy of the NO molecule // Phys. Rev. A. 2005. V. 72(1): 012714.
6. *Guimarães F. F.* [et al.]. Quantum wave packet revivals in IR + X-ray pump–probe spectroscopy // Chem. Phys. Lett. 2005. V. 405(4–6). P. 398–403.
7. *Guimarães F. F.* X-ray spectroscopy of molecules driven by strong infrared fields: PhD thesis. — Stockholm: Royal Institute of Technology, 2006.
8. *Felicíssimo V. C.* [et al.]. The principles of infrared-x-ray pump-probe spectroscopy. Applications on proton transfer in core-ionized water dimers // J. Chem. Phys. 2005. V. 122(9): 094319.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Влияние введения фторсодержащих заместителей в состав ацетилацетонового лиганда на фотофизические свойства комплексов Eu^{3+} с ним

***И. В. Тайдаков*[1], *М. Т. Метлин*[1,2], *В. М. Коршунов*[1,2], *С. Р. Заниздра*[2]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана (национальный исследовательский университет)

Координационные соединения трехвалентных ионов лантаноидов Ln^{3+} являются перспективным классом люминесцентных материалов для широкого спектра практических задач и фундаментальных исследований [1]. В таких соединениях люминесценция происходит за счет внутриконфигурационных 4f переходов Ln^{3+}, которые запрещены правилами отбора. Органические лиганды в составе комплекса приводят к частичному снятию запрета на переходы, а также выступают в качестве «антенны» [2], то есть поглощают энергию света, осуществляющего возбуждение, и передают ее на Ln^{3+}. Одним из способов увеличения квантового выхода таких соединений является замещение метильных групп в составе лиганда на CF_3 фрагменты. Известно, что введение электроотрицательного атома приводит к перераспределению электронной плотности в молекуле лиганда, что влияет на фотофизические свойства всего соединения в целом. К настоящему времени не было проведено комплексных исследований как замещение радикалов в простейшем 1,3-дикетоновом лиганде влияет на люминесцентные свойства комплексов с ним.

Целью настоящей работы является исследование зависимости фотофизических свойств комплексов Eu^{3+} со следующими лигандами: ацетилацетоном (Acoc), трифторацетилацетоном (TFAA) и гексафторацетилацетоном (HFAA). Для достижения поставленной цели были зарегистрированы спектры оптического возбуждения, поглощения и люминесценции, был измерен внешний квантовый выход и произведено исследование термостабилизированной люминесценции.

Спектры фотолюминесценции демонстрируют значительное расщепление энергетических уровней в силу эффекта Штарка. В работе показано, что при последовательном замещении в лигандах метильных радикалов фторированными происходит относительное увеличение интенсивности гиперчувствительного перехода $^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ к общей интенсивности спектра, что свидетельствует о смещении расположения излучающего иона относительно центра симметрии координационного полиэдра. Также происходит изменение типа симметрии координационного полиэдра. Таким образом, в работе экспериментально установлено, что варьирование лигандного окружения изменяет свойства координационного полиэдра, что приводит к существенному (более, чем в два раза) увеличению внутреннего квантового выхода.

Однако увеличение внутреннего квантового выхода не гарантирует увеличение внешнего квантового выхода, так как на фотолюминесценцию оказывают значительное влияние как процессы ее тушения, так и эффективность передачи энергии возбуждения с лиганда на ион. В связи с этим, в данной работе исследована зависимость влияния лигандного окружения на процессы безызлучательной релаксации. Также были оценены величины энергетического зазора между синглетным и триплетным уровнями лиганда ($\Delta E_{S\text{-}T}$) и триплетным уровнем лиганда и излучающим уровнем иона ($\Delta E_{T\text{-}Ln}$) и соответствие их эмпирическим правилам Рейнхудта [3] и Латва [4].

В работе [5] описано, что комплекс Eu(Acoc)2 имеет низкий внешний квантовый выход, что связывают в первую очередь с наличием у данного комплекса состояния с переносом заряда от лигандного окружения к иону (LMCT). Однако не были представлены данные о других возможных механизмах тушения фотолюминесценции, в частности, обратный тепловой перенос от иона к лигандному окружению и мультифононная релаксация.

В настоящей работе экспериментально показано, что тушителем люминесценции в данном комплексе выступает не только состояние с переносом заряда, но и неоптимальные энергетические зазоры в

соответствии с эмпирическими правилами Рейнхудта и Латва (ΔE_{S-T}=6100 см$^{-1}$, ΔE_{T-Ln}=7900 см$^{-1}$). Также экспериментально подтверждено, что при замещении метильных групп CF_3-группами не происходит оптимизации энергетических зазоров в исследуемых соединениях с точки зрения вышеупомянутых правил, однако при этом значительно уменьшается вклад в тушение со стороны LMCT состояния (рис. 2).

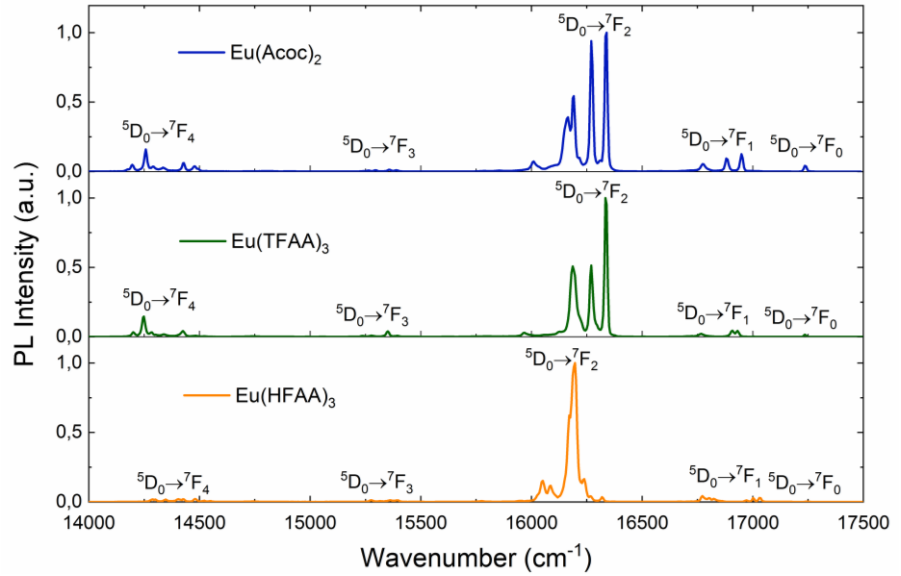


Рис. 1. Спектры

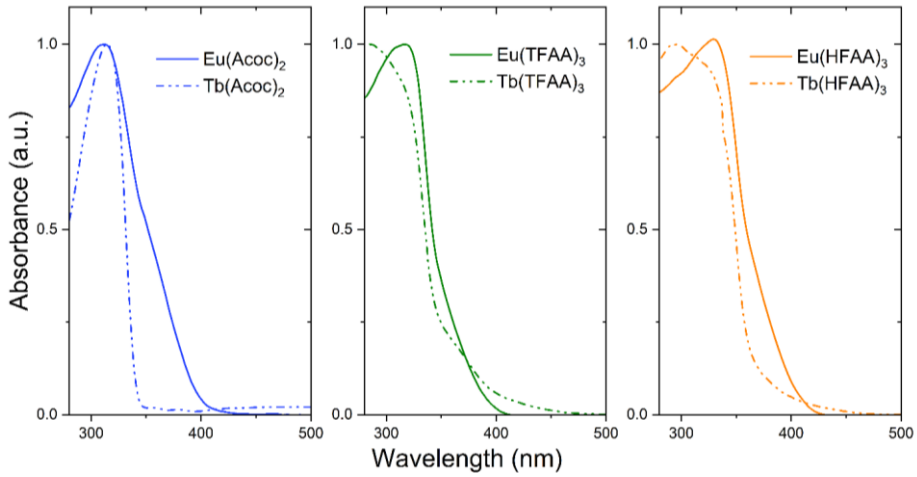


Рис. 2. Спектры диффузного отражения комплексов Eu^{3+} и Tb^{3+}

С целью оценки влияния процесса мультифононной релаксации на тушение люминесценции было произведено исследование термостабилизированной люминесценции. В частности, для комплекса $Eu(TFAA)_3$ было показано, что при изменении температуры (от 77 до 300 К) не происходит значительного изменения кинетик фотолюминесценции (рис. 3), а, значит, и константы безызлучательного переноса. Это означает, что мультифононная релаксация не играет значительной роли в тушении фотолюминесценции. Кроме того, также исключается процесс обратного теплового переноса энергии как механизма безызлучательной релаксации, так как тепловая энергия (kT~208 см$^{-1}$) много меньше ΔE_{T-Ln}.

Таким образом, в настоящей работе показано, что последовательное замещение метильных групп CF_3 группами в составе лиганда типа Acoc приводит к значительному увеличению внутреннего квантового выхода вследствие изменения типа симметрии координационного полиэдра и расположения иона Eu^{3+} относительно его центра, так как это приводит к частичному снятию запрета на внутриконфигурационные 4f переходы. Также установлено, что замена только одного метильного фрагмента в Acoc на CF_3 (TFAA) приводит к практически полному исчезновению состояния с переносом заряда, однако замещение второго метильного фрагмента (HFAA) приводит к возникновению некоторой полосы LMCT, что может являться причиной небольшого уменьшения коэффициента сенсибилизации (0,238 для $Eu(TFAA)_3$ и 0,19 для $Eu(HFAA)_3$). Однако внешний квантовый выход $Eu(HFAA)_3$ (10%) превышает внешний квантовый выход $Eu(TFAA)_3$ (6%).

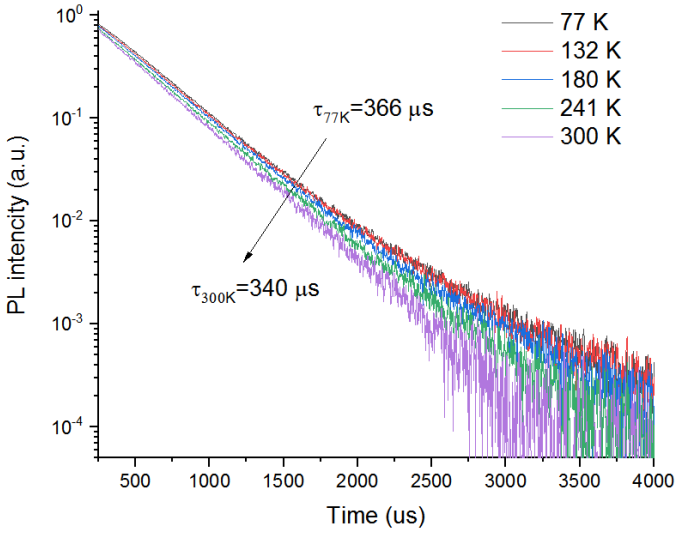


Рис. . Кинетики фотолюминесценции комплекса $Eu(TFAA)_3$ при различных температурах

Литература

1. *Eliseeva S. V., Bünzli J-C. G.* Lanthanide luminescence for functional materials and bio-sciences Chem. Soc. Rev. 2010. V. 39(1). P. 189–227.
2. *Weissman S. I.* Intramolecular energy transfer. The fluorescence of complexes of europium // J. Chem. Phys. 1942. V. 10(4). P. 214–217.
3. *Van der Tol E. B.* [et al.]. Tetraazatriphenylenes as extremely efficient antenna chromophores for luminescent lanthanide ions // Chem. Eur. J. 1998. V. 4(11). P. 2315–2323.
4. *Latva M.* [et al]. Correlation between the lowest triplet state energy level of the ligand and lanthanide(III) luminescence quantum yield // J. Lumin. 1997. V. 75(2). P. 149–169.
5. *Napier G. D. R., Neilson J. D., Shepherd T. M.* Charge-transfer excited state in tris(acetylacetonato) europium(III) // Chem. Phys. Lett. 1975. V.31(2). P. 328–330.

УДК 535.37

Исследование формы линий в оптических спектрах кристаллов $Y(Al)_3(BO_3)_4$-Pr^{3+}

***Т. А. Иголкина*[1,2], *Е. П. Чукалина*[1]**

[1]Институт спектроскопии РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Алюмоборат иттрия $YAl_3(BO_3)_4$ (пространственная группа симметрии *R32)* относится к семейству боратов со структурой природного минерала хантита. Данное соединение обладает рядом благоприятных физико-химических свойств, такими как механическая, химическая и термическая стабильность, прозрачность в широкой области спектра, уникальная теплопроводность [1], наиболее высокий нелинейный оптический коэффициент среди кристаллов со структурой хантита [2]. Легирование их редкоземельным ионом Pr^{3+}, демонстрирующим сильную УФ-люминесценцию в области d-f переходов [3], открывает возможности для создания лазеров в синем и УФ диапазоне. Кроме того, кристаллы, легированные Pr^{3+}, сегодня активно рассматриваются в качестве материалов для устройств квантовой информатики. Так, например, была успешно продемонстрирована возможность эффективной когерентной передачи на сверхтонких подуровнях иона Pr^{3+} в Y_2SiO_5:Pr^{3+} [4], что позволяет рассматривать легированные Pr^{3+} кристаллические соединения в качестве перспективных материалов для создания квантовых гейтов [2].

В ранних спектроскопических работах [5, 6] в результате анализа спектров поглощения и люминесценции кристаллов $YAl_3(BO_3)$-Pr (10%) был установлен энергетический спектр уровней мультиплетов $^3H_{4,5,6}$, $^3F_{2,3,4}$, $^1G_4$, $^1D_2$, $^3P_{0,1,2}$, $^1I_6$ иона Pr^{3+}, а также произведен расчет по теории кристаллического поля. Тем не менее данные статьи [5] не содержат информации об энергетической структуре мультиплетов $^3H_{5,6}$, $^1G_4$ и $^1I_6$. В свою очередь, полученная в результате широкодиапазонного исследования с высоким спектральным разрешением [6] схема штарковских уровней иона Pr^{3+} в $YAl_3(BO_3)_4$ содержит ряд

дополнительных линий, что противоречит теоретическому расчету. Кроме того, в статье [6] сообщается о наблюдении дублетной и более сложной структуры отдельных спектральных линий, которая в статье подробно не обсуждается.

Целью настоящей работы является уточнение информации о значениях энергии штарковских уровней иона Pr^{3+} в $YAl_3(BO_3)_4$ и объяснение наблюдаемой дублетной структуры спектральных линий в спектрах пропускания и люминесценции, зарегистрированных с высоким спектральным разрешением в области *f-f* переходов в ионах Pr^{3+}.

Монокристаллы $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} (1%) были выращены методом флюса на основе тримолибдата висмута [7]. Толщина исследуемого образца составляла 4,1 мм. Спектры поглощения в области 2000–23000 $см^{-1}$ и спектры люминесценции в области 6000-23000 $см^{-1}$ были зарегистрированы на фурье-спектрометре Bruker IFS 125 HR. Измерения производились в диапазоне температур 5–300 K, в ходе эксперимента образец находился в криостате замкнутого цикла Sumitomo SHI SRP092. Спектральное разрешение составляло до 0,05 $см^{-1}$. Люминесценция образца возбуждалась с использованием полупроводникового лазера с длиной волны излучения 450 нм.

В кристаллах $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} ионы Pr^{3+} изоморфно замещают ионы Y^{3+} и занимают позицию с точечной группой симметрии D_3. Волновые функции штарковских уровней некрамерсовского иона Pr^{3+}, находящегося в кристаллическом поле данной симметрии, преобразуются по синглетным Γ_1, Γ_2 и одному дважды вырожденному Γ_3 неприводимым представлениям.

В настоящей работе на основе анализа температурной зависимости спектров пропускания и люминесценции уточнена энергетическая схема штарковских уровней мультиплетов $^3H_{4,5,6}$, $^3F_{2,3,4}$, $^1G_4$, $^1D_2$, $^3P_{0,1,2}$, $^1I_6$. Благодаря использованию высокого спектрального разрешения в спектрах люминесценции удалось обнаружить характерную дублетную структуру спектральных линий, форму которых мы связываем с наличием деформаций в кристалле. На рис. 1*а,б* красным цветом представлены две спектральные линии, вероятно относящиеся к переходам $^3P_1$+$^1I_6$→$^3F_3$ в ионе Pr^{3+}. В рамках предложенной в работе [8] модели было проведено моделирование, результат которого также показан на рис. 1*а,б* серой пунктирной линией. Полученные значения параметров моделирования приведены в табл. 1.

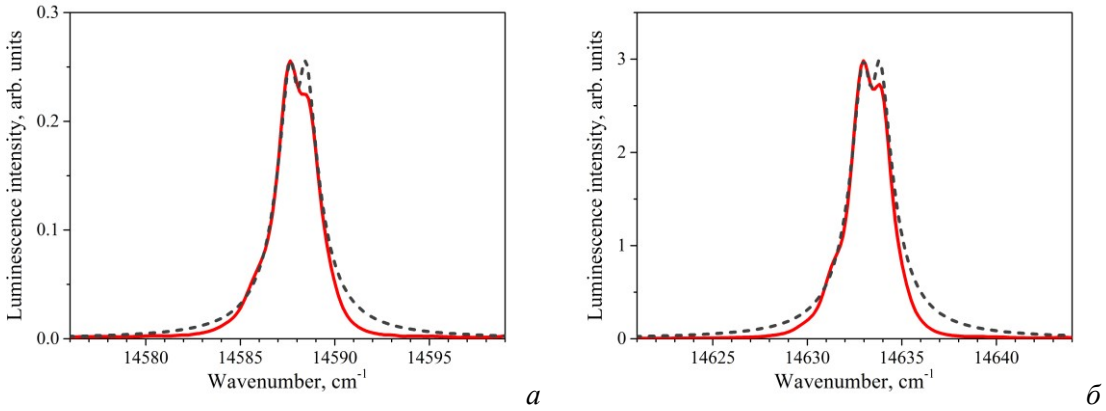


Рис. 1. Низкотемпературный спектр люминесценции кристалла YAB:Pr^{3+}(1%) в области 14576-14599 $см^{-1}$ (*а*) и 14621–14644 $см^{-1}$ (*б*). T=5 K

Таким образом, из анализа температурной зависимости спектров пропускания и сравнения их со спектрами люминесценции была уточнена схема штарковских уровней основного и возбужденных мультиплетов иона Pr^{3+} в $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+}. Полученная информация может быть использована для лазерных приложений и применений в области квантовой информатики. В спектрах люминесценции кристалла $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} (1%) обнаружены спектральные линии с характерной дублетной структурой. К подобным расщеплениям спектральных линий может приводить понижение локальной симметрии, вызванное случайными деформациями кристаллической решетки. Наблюдаемую асимметрию линий (рис. 1*а,б*) можно объяснить проявлением примесных центров, обусловленных вхождением Bi (Mo) из флюса при росте кристалла, в пользу чего также свидетельствует наличие дополнительных спутников линий в спектрах поглощения. Проведено моделирование в рамках предположения о деформационной природе наблюдаемого расщепления. Для подтверждения установленной энергетической схемы штарковских уровней основного и возбужденных мультиплетов иона Pr^{3+} в $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} и обоснования сделанного предположения о природе наблюдаемой дублетной структуры спектральных линий необходимо проведение в дальнейшем теоретического расчета.

Авторы выражают благодарность Гудим И.А. за предоставленный для проведения исследования монокристалл $YAl_3(BO_3)_4$-Pr^{3+} (1%), а также Болдыреву К.Н. за помощь при регистрации спектров люминесценции. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 23-22-00433.

Таблица 1. Параметры моделирования (величина сверхтонкого расщепления ΔE_{HF}, среднеквадратичное отклонение гауссиана оптического перехода ν_0 и полуширина деформационного распределения ν_D) формы некоторых линий в спектре люминесценции, обладающих характерной дублетной структурой (рис 1*а*,*б*)

λ, см$^{-1}$	ΔE_{HF}, см$^{-1}$	ν_0, см$^{-1}$	ν_D, см$^{-1}$
14588,05	0,080	0,66	1,025
14633,40	0,092	0,61	1,020

Литература

1. *Maltsev V. V.* [et al.]. Growth and thermophysical properties of $RAl_3(BO_3)_4$ (R = Y, Nd, Gd, Lu) and $RMgB_5O_{10}$ (R = Y, La, Gd) crystals // Inorg. Mater. 2020. V. 56. P. 612–625.
2. *Goldner P, Guillot-Noël O.* Magnetic interactions in Pr^{3+}:$LiYF_4$ for quantum manipulation: Search for an efficient three-level Λ system // Mol. Phys. 2004. V. 102(11–12). P. 1185–1192.
3. *Laroche M.* [et al.]. Experimental and theoretical investigation of the $4f^n \leftrightarrow 4f^{n-1}5d$ transitions in YPO_4:Pr^{3+} and YPO_4:Pr^{3+}, Ce^{3+} // J. Condens. Matter Phys. 2001. V. 13. P. 765–776.
4. *Fraval E*. [et al.]. Dynamic decoherence control of a solid-state nuclear-quadrupole qubit Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95: 030506.
5. *Bartl M. H*. [et al.]. Growth, optical spectroscopy and crystal field investigation of $YAl_3(BO_3)_4$ single crystals doped with tripositive praseodymium Spectrochim. Acta A. 2001. V. 57. P. 1981–1990.
6. *Mazzera M. M*. [et al.]. Spectroscopic analysis of Pr^{3+} crystal-field transitions in $YAl_3(BO_3)_4$ // Appl. Phys. B. 2011. V. 104. P. 603–617.
7. *Gudim I. A*. [et al.]. Flux growth and spin reorientation in trigonal $Nd_{1-x}Dy_xFe_3(BO_3)_4$ single crystals // J. Cryst. Growth. 2010. V. 312. P. 2427–2430.
8. *Klimin S. A.* [et al.]. High-resolution transmission and luminescence spectroscopy of Pr^{3+}:YPO_4 // J. Lumin. 2021. V. 235: 118003.

УДК 533.922

Учет динамики колебательно-возбужденных состояний водорода в нестационарной модели газовой атмосферы вблизи плазменного источника излучения

Т. Линкова[1]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Развитие современной техники непрерывно связано с прогрессом в сфере микроэлектроники и печати микрочипов. На сегодняшний момент лидеры мирового производства стремятся перейти к технологиям печати микросхем с минимальным размером элементов равным 10 нм и меньше. Минимальный размер в микрочипе ограничен дифракционным пределом и зависит от длины волны источника излучения, который используется в литографе. Для достижения разрешения в 10 нм требуется использование нового поколения литографов на основе излучения с длиной волны в области экстремального ультрафиолета. Примером источника с необходимыми для фотолитографии характеристиками является плазменный источник излучения с длиной волны 13.5 нм, излучение в котором получается на основе импульсов плазмы олова [1]. Для сбора излучения в источнике используется чувствительная оптика, имеющая максимум отражательной способности вблизи 13.5 нм. Возможность работы источника ЭУФ-излучения зависит от уровня загрязнения поверхности интерференционного зеркала, которое используется для фокусировки. Для защиты поверхности зеркала от оседания ионов олова, в камеру источника излучения запускают поток водорода, который тормозит ионы, увлекая их в противоположную от зеркала сторону, а затем за пределы камеры [2, 3]. Водород в камере формирует газовую защиту коллекторного зеркала. Изучение свойств водородной атмосферы вблизи плазмы высокой температуры является актуальной задачей прикладной науки.

Модель, описывающая процессы внутри камеры источника излучения, должна включать в себя химические реакции с участием водорода в объеме и на стенках камеры, взаимодействие плазмы и газа, а также его гидродинамику. Благодаря высоким температурам плазмы в главном фокусе температурный диапазон исследования газа должен включать в себя значения 500–3000 К. При таких значениях

температуры в молекулах газа активируются дополнительные степени свободы в виде колебаний. Перенос энергии в эти степени свободы влияет на общий баланс энергии в системе, а соответственно и на транспорт ионов олова в камере. Задача о колебательных процессах молекул водорода в камере плазменного источника излучения является нестационарной, поэтому колебания должны быть учтены явно, посредством химических реакций, которые определяют вычисление концентраций компонент в камере источника и дальнейшее решение уравнений состояния.

В работе рассматривается влияние явного моделирования процессов колебательного возбуждения и их релаксации на энергетический баланс в камере плазменного источника ЭУФ-излучения. В модель, описывающую поведение газовой защитной атмосферы, добавлены химические процессы столкновений водорода [4], которые приводят образованию колебательных состояний вплоть до третьего колебательного уровня и обратные к ним. При температурах выше 2000 К ожидается влияние процессов диссоциации на переход энергии в колебательные степени свободы, поэтому были учтены реакции диссоциации из колебательно-возбужденных состояний [4]. Определено, что столкновения с ионами H^+ при высоких энергиях частиц изменяют динамику производства колебательных состояний выше первого. Столкновения с ионами водорода увеличивают количество возбужденных молекул и, следовательно, долю энергии, запасенной в этих состояниях. Решение кинетических уравнений транспорта ионов по камере источника, вычисление интеграла плотности зависит от того, какая доля энергии соответствует колебательной температуре. Следовательно определение колебательной температуры системы позволит повысить точность моделирования уровня загрязнения зеркала. Определено, что при мощности импульсов источника равной 100 кГц, температура в главном фокусе изменяется на $\Delta T \sim 75\ K$. Температура входит в уравнения, учитывающие скорость химических реакций в экспоненциальной форме, а значит более точное ее вычисление приведет уточнению остальных уравнений движения ионов по камере. По результатам расчетов проиллюстрировано изменение траекторий движения ионов олова в объеме камеры.

Литература

1. *Абраменко Д. Б.* [и др.]. Плазменные источники экстремального ультрафиолетового излучения для литографии и сопутствующих технологических процессов (к 50-летию Института спектроскопии РАН) // УФН. 2019. Т. 189. № 3. С. 323–334.
2. *Fomenkov I* [et al.]. Light sources for high-volume manufacturing EUV lithography: technology, performance, and power scaling // Adv. Opt. Technol. 2017. V. 6(3). P. 173–186.
3. *Banine Y.* [et al.]. Physical processes in EUV sources for microlithography // J. Phys. D: Appl. Phys. 2011. V. 44(25): 253001.
4. *Lepp S., Shull J. M.* The kinetic theory of H2 dissociation // Astrophys. J. 1983. V. 270(1). P. 578–582.

УДК 535.37, 535.24, 535.65.088.3, 535.6

Повышение точности ратиометрических люминесцентных термометров с помощью машинного обучения

***Т. А. Поликовский*[1,2], *В. М. Коршунов*[1], *М. Т. Метлин*[1], *И. В. Тайдаков*[1]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

В современном мире точное измерение температуры имеет ключевое значение для различных отраслей науки, таких как биомедицина и авиастроение, а также для фундаментальных исследований [1]. Традиционные температурные датчики, такие как термисторы и термопары, основаны на контактных измерениях. Однако прямой тепловой контакт с объектом делает такие датчики непригодными для измерения труднодоступных или быстро двигающихся объектов [2]. Среди методов бесконтактного измерения температуры в последние годы особое внимание привлекает люминесцентная термометрия благодаря своей способности обеспечивать высокоточные измерения температуры в различных температурных диапазонах. Метод основан на измерении температурозависимых свойств люминесценции материалов, таких как интенсивность, время жизни люминесценции и форма спектра люминесценции, которые обеспечивают взаимосвязь между люминесценцией и температурой исследуемого образца.

Однако точность и чувствительность этого метода ограничены несколькими факторами. Во-первых, при определении температуры используется относительно простая модель передачи энергии Мотта-Зейтца [3], получаемая из распределения Больцмана. Данная модель не учитывает множество процессов

обратного переноса энергии между ионами и с ионов на лиганд. Более того, стандартный метод люминесцентной термометрии, основанный на вычислении отношения интенсивностей люминесценции разных спектральных полос, может оказаться неточным для сложных материалов или при неидеальных экспериментальных условиях. Кроме того, для этого метода требуется соблюдение ряда экспериментальных условий, учет изменений концентрации люминофора и нормировка спектров люминесценции [2]. Эти ограничения могут повлиять на достоверность и воспроизводимость измерений температуры, полученных с использованием классического метода. Для преодоления этих ограничений можно применять методы машинного обучения и глубокого обучения в люминесцентной термометрии.

В данной работе было проведено исследование оптических свойств новых полимерных смешанно-металлических координационных соединений ионов Eu^{3+} and Tb^{3+} с органическим лигандом из класса 1,3-дикетонов. Поскольку одно из исследованных соединений

Обнаружено, что в спектре люминесценции комплекса $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при комнатной температуре наблюдаются полосы излучения отдельных ионов Eu^{3+} и Tb^{3+} (Рис.1, слева). Показано, что в кинетике люминесценции этого соединения, зарегистрированной на длине волны 710 нм, появляется дополнительная временная компонента разгорания интенсивности в первые 100 мкс, связанная с переносом энергии между ионами (рис. 1, справа). Такая кривая затухания может быть аппроксимирована с использованием следующих соотношений [4]:

$$\begin{cases} C_{Eu^*} = C_1 e^{-k_{Eu}t} + C_2 e^{-(k_{ET}+k_{Tb})t} \\ C_{Tb^*} = C^0_{Tb^*}\, e^{-(k_{ET}+k_{Tb})t}, \end{cases} \quad (1)$$

где

$$\begin{cases} C_2 = -C^0_{Tb^*} \dfrac{k_{ET}}{k_{ET} + k_{Tb} - k_{Eu}} \\ C_1 = C^0_{Eu^*} - C_2, \end{cases} \quad (2)$$

k_{ET}, k_{Tb} and k_{Eu} — константы скорости переноса энергии между ионами, излучательной релаксации возбужденных состояний ионов Tb и Eu соответственно; $C^0_{Eu^*}$ и $C^0_{Tb^*}$ — заселенности соответствующих энергетических уровней.

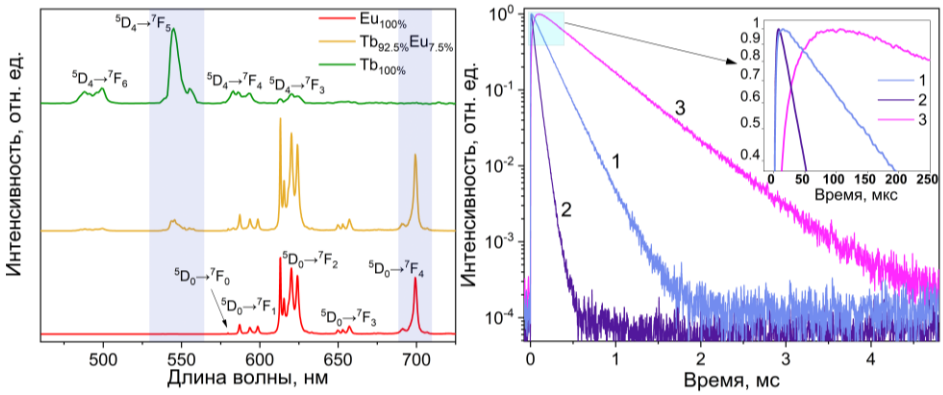


Рис. 1. Спектры люминесценции (слева) соединений $Eu_{100\%}$, $Tb_{100\%}$ и $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при непрерывном возбуждении на длине волны 360 нм; (справа) кривые затухания люминесценции соединений $Tb_{100\%}$ при 545 нм (1), для $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при 545 нм (2) и для $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при 710 нм (3) с импульсным возбуждением при 360 нм. Все измерения проводились при комнатной температуре 298 K

Спектры люминесценции комплекса $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при разных температурах от 77 до 298 K показаны на рис. 2. Видно, что при возрастании температуры интенсивность спектральной полосы с максимумом на 700 нм, связанной с излучательным переходом $^5D_0 \rightarrow {}^7F_4$ иона Eu^{3+}, увеличивается. Одновременно с этим, интенсивность полосы на 545 нм, связанной с излучательным переходом $^5D_4 \rightarrow {}^7F_5$ иона Tb^{3+} падает. Был оценен параметр Δ — отношение интегральных интенсивностей полос с максимумами на 545 и 700 нм. Полученная ратиометрическая зависимость $\Delta(T)$ позволяет по спектру люминесценции определять температуру комплекса. В результате среднеквадратичная ошибка (RMSE), оцененная в диапазоне 190–298 K, составила 2.54 K.

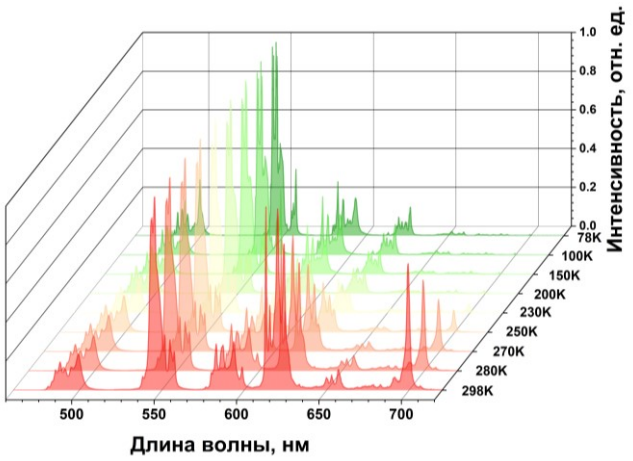


Рис.2. Спектры люминесценции комплекса $Tb_{92.5\%}Eu_{7.5\%}$ при разных температурах

Для повышения точности определения температуры, были применены различные алгоритмы машинного и глубокого обучения. В качестве датасета были использованы ранее полученные спектры. Результаты оценки точности моделей представлены на рис.3. При применении сверточной нейронной сети точность предсказания температуры выросла в 7 раз (RMSE=0.36 K), что говорит о преимуществе использования многопараметрических алгоритмов машинного обучения относительно стандартной модели, основанной на параметре Δ.

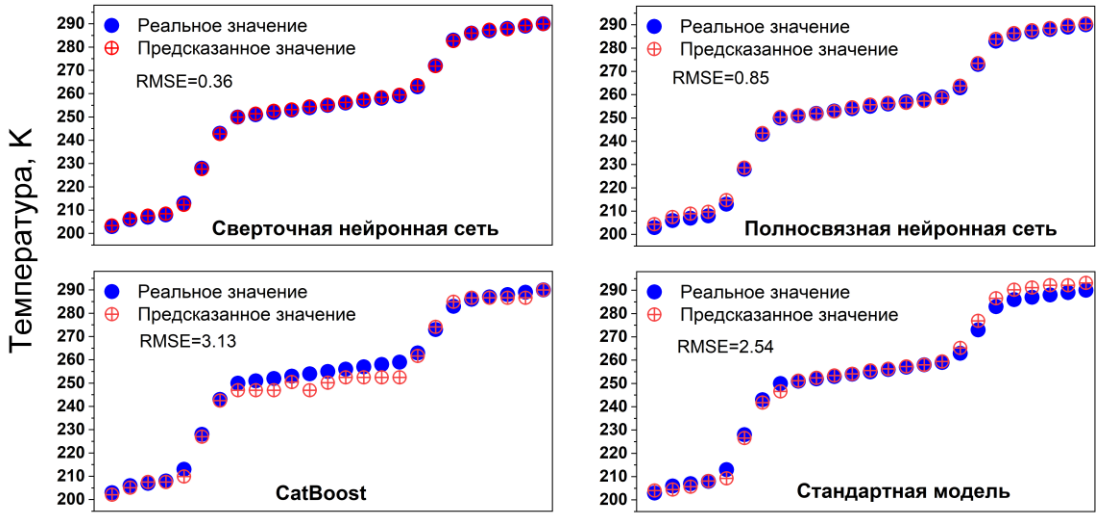


Рис. 3. Диаграмма фактических (экспериментально полученных) и предсказанных значений при разных температурах

Литература

1. *Brites C. D. S.*, *Millán A.*, *Carlos L. D.* Lanthanides in luminescent thermometry // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. Elsevier. 2016. V. 49. P. 339–427. DOI: 10.1016/bs.hpcre.2016.03.005.
2. *Suo H.* [et al.] Rational design of ratiometric luminescence thermometry based on thermally coupled levels for bioapplications // Laser & Photonics Reviews. 2021. V. 15(1): 2000319. DOI: 10.1002/lpor.202000319.
3. *Bos A. J. J.* Theory of thermoluminescence // Radiation measurements. 2006. V. 41. P. S45–S56. DOI: 10.1016/j.radmeas.2007.01.003.
4. *Gontcharenko V. E.* [et al.] Mono-and mixed metal complexes of Eu3+, Gd3+, and Tb3+ with a diketone, bearing pyrazole moiety and CHF2-group: Structure, color tuning, and kinetics of energy transfer between lanthanide ions // Molecules. 2021. V. 26(9). P. 2655. DOI: 10.3390/molecules26092655.

Секция космических исследований и современной астрофизики

Председатель: А. М. Садовский (к.ф.-м.н., доцент)

Зам. председателя: В. С. Бескин (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: А. Ю. Малыхин

Дата: 02.04.2024 Время: 10:00

УДК 550.388.2; 550.388.8; 551.594.5

Экспериментальная методика исследований и контроля характеристик полярной ионосферы

***А. Д. Соколов*[1,2], *А. К. Кузьмин*[2]**

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

В высокоширотной или полярной ионосфере Земли (60° и выше) протекает множество процессов, не характерных для более низких широт. Эта особенность обусловлена взаимодействием ионосферы, магнитосферы, плазмосферы, и высыпающихся частиц солнечного ветра. В результате этих взаимодействий в полярной ионосфере образуются неоднородности электронной концентрации.

Одним из следствий образования неоднородностей N_e являются сцинтилляции трансполярных сигналов, пересекающих их: флуктуации их фазы и амплитуды, из-за которых нарушается качество их распространения, а соответственно и связи. Физические причины процессов еще мало изучены, поэтому возникает практический интерес в исследованиях появлений неоднородностей электронной концентрации N_e в E- и F-слоях полярной ионосферы, а также сцинтилляций сигналов, возникающих из-за них.

Полярная ионосфера Земли имеет долгую историю как наземных, так и орбитальных экспериментов по изучению ее характеристик. В данной работе рассматривается перспективная методика, которая основывается на комплексе различных экспериментов, нацеленная на исследования процессов, и одновременный контроль характеристик полярной ионосферы в различных геофизических и геомагнитных условиях. На рис.1 представлена блок-схема методики, она состоит из нескольких основных блоков: экспериментального, в который входят приборы, построенные на основе различных методах измерений; блока ПО для расчетов различных географических, геомагнитных, геофизических параметров вдоль орбит КА и в конкретных областях дистанционных наблюдений; блока обработки данных, в которой данные, получаемые в экспериментальной части, обрабатываются с учетом абсолютных калибровок приборов и преобразуются в характеристики полярной ионосферы, и блока модельного сопровождения характеристик в конкретных секторах MLT полярной ионосферы и сравнения измеренных характеристик, по результатам которого строится краткосрочный прогноз условий в пересекаемых секторах ионосферы, приводящих к сцинтилляциям трансполярных сигналов орбитальных навигационных систем.

Экспериментальная часть методики строится на основе измерений с помощью комплекса приборов, которые могут располагаться на КА, платформах зондирующих ракет, наземных станциях и других объектах, например БПЛА. Все измерения делятся на прямые, дистанционные (с помощью авроральных имаджеров, камер всего неба и систем навигации) и локальные в конкретных точках на Земле (с помощью таких приборов как магнитометры, риометры и др.). Основная задача экспериментальной части методики — получать данные измерений, необходимые для исследований и контроля характеристик полярной ионосферы.

Следующая часть методики заключается в обработке данных, которые были получены с помощью различных приборов. Данные делятся на несколько основных категорий:

1) изображения авроральных эмиссий;
2) энергетические характеристики высыпающихся заряженных частиц;

3) электрические поля в конкретных точках;
4) динамика сцинтилляций.

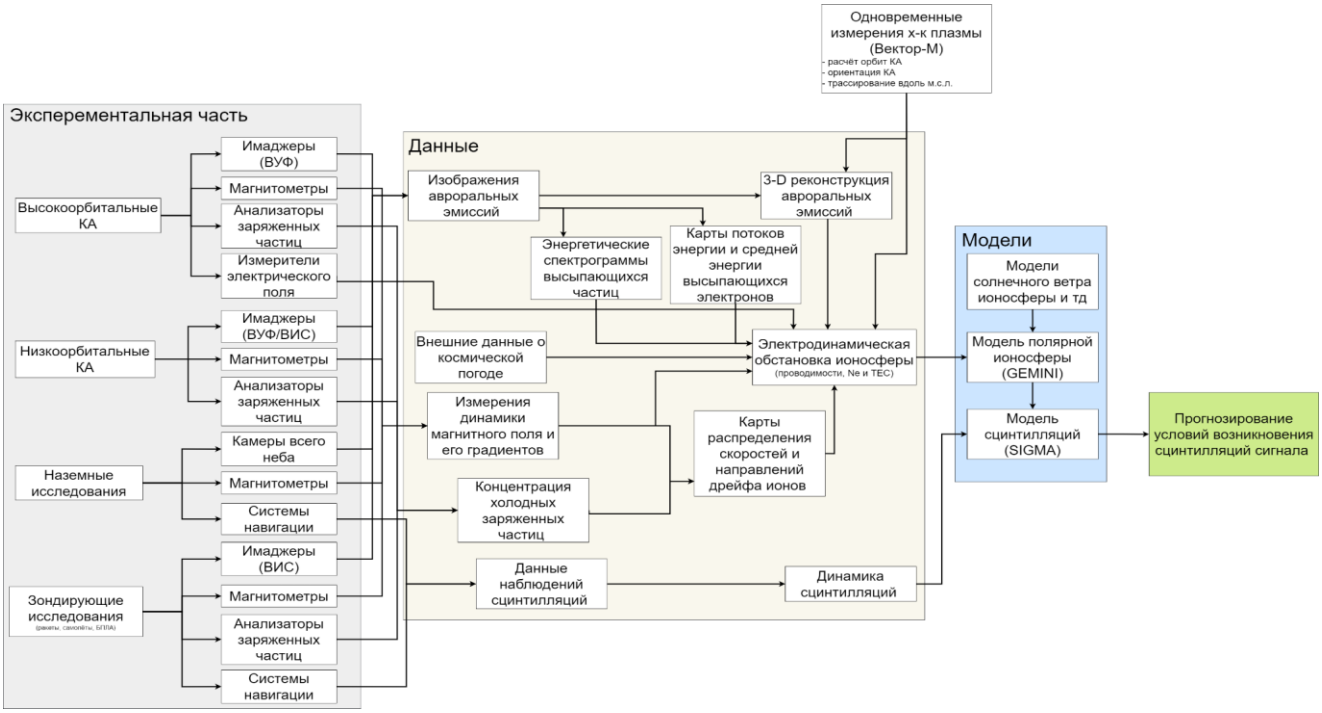


Рис. 1. Блок-схема методики изучения характеристик полярной ионосферы

Изображения авроральных эмиссий в авроральных структурах, являются важной частью методики (см. Аннотированный атлас примеров авроральных структур [1, 2]). Авроральные эмиссии также известные как полярные сияния возникают из-за высыпаний ионосферу и верхнюю атмосферу энергичных заряженных частиц солнечного ветра, ускоренных в ближней магнитосфере. В результате взаимодействия с разными компонентами ионосферы и верхней атмосферы образуются эмиссии в разных диапазонах длин волн и на разных высотах. Отношения интенсивностей некоторых эмиссий можно использовать для расчета средней энергии и потока энергии высыпающихся частиц [3–5]. В свою очередь эти характеристики могут быть использованы для определения проводимостей Холла и Педерсена, интегрированных по высоте [6]. В результате с помощью изображений нескольких авроральных эмиссий возможно получать двумерные карты распределений энергетических характеристик потоков высыпающихся частиц, которые можно использовать для расчета локальных неоднородностей электронной концентрации.

Динамика компонент магнитного поля, продольных токов, потоков заряженных частиц и электрического поля в конкретных точках будет отслеживаться на основе данных с конкретных приборов. С их помощью можно будет контролировать электродинамическую обстановку в конкретных секторах MLT полярной ионосферы, которую можно использовать для совершенствования других элементов методики.

Динамика сцинтилляций сигналов может отслеживаться по данным работы приемников систем навигации. Эта часть методики необходима для анализа и сравнения характеристик сцинтилляций, полученных экспериментально и с помощью моделей.

Также важным элементом методики является возможность проводить координированные эксперименты на разных орбитах, когда разные КА на разных высотах пересекают окрестность одной и той же магнитной силовой линии. Суть таких экспериментов заключается в одновременных измерениях в одной и той же области с помощью разномасштабных наблюдений. Подобные совместные эксперименты могут позволить одновременно получать глобальную и локальную трехмерную электродинамическую обстановку в полярной ионосфере.

Важнейшей частью методики является использование моделирования, чтобы из данных локальных градиентов электронной концентрации получать информацию об условиях и неустойчивостях в ионосферной плазме, способствующих генерации процессов, приводящих к сцинтилляциям сигналов. На данный момент такими моделями являются зарубежные модели GEMINI [7] и SIGMA [8,9], которые при их комплексном использовании, как показано в статье [10], позволяют симулировать процессы, происходящие в высокоширотной ионосфере, приводящих в конечном счете к сцинтилляциям трансполярных сигналов.

Литература

1. *Кузьмин А. К.* [и др.]. Аннотированный атлас примеров изображений эмиссий в авроральных структурах, зарегистрированных имаджерами и изображающими спектрографами с разных орбит и поверхности земли. Часть 1. Авроральные структуры, возбужденные природными источниками, включая альфвеновские волны // Гелиогеофизические исследования. 2022. Т. 36. С. 3–36. DOI: 10.5425/2304-7380_2022_36_3.
2. *Кузьмин А. К.* [и др.]. Аннотированный атлас примеров изображений эмиссий в авроральных структурах, зарегистрированных имаджерами и изображающими спектрографами с разных орбит и поверхности земли. Часть 2. Авроральные и аврораподобные структуры, возбужденные природными источниками, включая волны нескольких типов // Гелиогеофизические исследования. 2023. Т. 40. С. 15-67. DOI: 10.5425/2304-7380_2023_40_15.
3. *Rees M. H., Luckey D.* Auroral electron energy derived from ratio of spectroscopic emissions 1. Model computations // J. Geophys. Res. 1974. V. 34. P. 5181–5186. DOI:10.1029/JA079i034p05181.
4. *Germany G. A.* [et al.] Auroral Observations from the POLAR Ultraviolet Imager (UVI) // Geospace Mass and Energy Flow. — Washington, D. C.: American Geophysical Union, 1998. P. 149—160. DOI:10.1029/GM104p0149.
5. *Strickland D. J.* [et al.] Dependence of auroral FUV emissions on the incident electron spectrum and neutral atmosphere // J. Geophys. Res.: Space Phys. 1983. V. 88. P. 8051–8062. DOI: 10.1029/JA088iA10p08051.
6. *Robinson R. M.* [et al.] On calculating ionospheric conductances from the ux and energy of precipitating electrons // J. Geophys. Res.: Space Phys. 1987. V. 92. P. 2565–2569. DOI:10.1029/JA092iA03p02565.
7. *Zettergren M. D.* [et al.] GEMINI: Geospace Environment Model of Ion-Neutral Interactions. 2019. URL: https://https://zenodo.org/records/3528915 (дата обращения: 10.02.2024). DOI:10.5281/zenodo.3528914.
8. *Deshpande K. B.* [et al.] Satellite-beacon Ionospheric-scintillation Global Model of the upper Atmosphere (SIGMA) I: High latitude sensitivity study of the model parameters // J. Geophys. Res.: Space Phys. 2014. V. 119(5). P. 4026–4043. DOI: 10.1002/2013JA019699.
9. *Deshpande K. B.* [et al.] Satellite-beacon Ionospheric-scintillation Global Model of the upper Atmosphere (SIGMA) II: Inverse modeling with high-latitude observations to deduce irregularity physics // J. Geophys. Res.: Space Phys. 2016. V. 121(9). P. 9188–9203. DOI: 10.1002/2016JA022943.
10. *Deshpande K. B.* [et al.] Satellite-beacon Ionospheric-scintillation Global Model of the upper Atmosphere (SIGMA) III: Scintillation simulation using a physics-based plasma model // Geophys. Res. Lett. 2019. V. 46(9). P. 4564–4572. DOI: 10.1029/2019GL082576.

УДК: 524.7-1/-8

Моделирование рентгеновских спектров от ударных волн в астрофизических объектах

***А. Н. Нежин*[1,2], *Н. С. Лыскова*[2], *И. И. Хабибуллин*[2,3,4], *Е. М. Чуразов*[2,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт космических исследований РАН
[3]Университет Людвига и Максимилиана
[4]Институт астрофизики общества им. Макса Планка

Анализ рентгеновских спектров излучения является одним из основных методов получения информации в астрофизике. Однако при спектральных исследованиях не все параметры изучаемого объекта могут быть определены прямым образом. Соответственно, встает задача установления таких закономерностей в наблюдаемом спектре излучения, которые могут быть однозначно связаны с тем или иным свойством объекта.

В рамках представленного исследования основной акцент сделан на поиске закономерностей в рентгеновских спектрах разреженного газа, прошедшего через ударную волну, которая может быть результатом вспышки сверхновой или слияния скоплений галактик. Сразу за фронтом волны плазма оказывается в «недоионизованном» состоянии, из-за чего в спектре могут наблюдаться линии нехарактерные для случая равновесной ионизации. Изучение подобных линий может дать ценную информацию как о породившем ударную волну событии, так и о начальных параметрах газа (температуре и плотности).

Исследование проводится при помощи разработанной компьютерной модели, которая позволяет построить эволюции температур и ионных долей за ударной волной. При этом возможно варьирование темпа выравнивания температур между электронами и ионами от самого медленного — за счет кулоновских столкновений — до практически мгновенного — «ступенька». А также могут быть изменены такие параметры задачи, как начальная и конечная температуры и состав плазмы.

В ходе исследования особе внимание уделено интегральной эмиссии «промежуточных» ионных состояний — ионных состояний, которых нет в равновесии ни при температуре «до» ударной волны, ни

при температуре «после». Такие промежуточные ионные состояния существуют в процессе эволюции лишь ограниченное время. Это значит, что интегральная светимость в характерных для них линиях формируется на ограниченных масштабах, что позволяет использовать эти значения как показатель свойств плазмы, а также процессов, породивших ее термодинамическую и гидродинамическую эволюцию.

Работа имеет следующую структуру. В первой части приведены особенности используемой для исследования компьютерной модели. Вторая часть содержит описание проведенного модельного эксперимента. В третьей части обсуждаются полученные результаты.

УДК 524.387-17, 524.7-56

Генерация вспышек блазаров в гамма-диапазоне

***А. Р. Сяйфетдинов*[1], *М. М. Лисаков*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Блазары — самые мощные источники излучения во Вселенной. Спектр излучения блазаров простирается от длинных радиоволн до высокоэнергичного гамма-излучения и дальше в область нейтрино сверхвысоких энергий. При этом излучение на разных энергиях может происходить из разных частей блазаров. Так, например, аккреционный диск светит в оптическом диапазоне и УФ, релятивистский джет светит в радиодиапазоне. Однако до сих пор нет окончательного понимания того, где формируется гамма-излучение.

Несмотря на то, что массовый мониторинг блазаров в гамма-диапазоне ведется с 2011 года, качественно детектируемых вспышек остается недостаточно, чтобы в подробностях изучить механизм и место их происхождения. Вместе с этим компьютерные симуляции физических процессов, приводящих к вспышке, являются ресурсно затратными. В данном проекте мы разработали модель условного вариационного автоэнкодера (CVAE), обученного на вспышках блазаров с различными параметрами. Архитектура показана на рис. 1. На вход подается вектор вспышки и параметры квазара, на выходе получается вектор реконструированной вспышки.

Для обучения были взяты кривые блеска 331 источника из данных мониторинга космической обсерватории Fermi [1]. Мы использовали моделирование гауссовских процессов, чтобы интерполировать кривые блеска, определили значение производной кривой и выбрали значения порога, которые определяют начало и конец вспышки. Таким образом, мы выделили 869 вспышек. Для более точного и устойчивого обучения все вспышки были нормированы по осям времени и потока. Также модели подавалась группа физических параметров источников, которые, как мы считаем, влияют на форму вспышки. В параметры входят красное смещение z = (0,1–0,93), доплер фактор δ = (0,2–88,4), гамма фактор Г= (1,06–141,2), угол наклона джета к лучу зрения θ= (0,0–78,9) градусов и длительность вспышки в системе отсчета источника = (8,08–2676,8) дней. Большинство данных взяты из каталога [2]. Для измерения ошибки между сгенерированной и истинной вспышками была выбрана средняя абсолютная ошибка (MAE), она равна 0,10 на валидационной и тестовой выборках. На рис. 2 можно увидеть, что модель хорошо улавливает структуру вспышек.

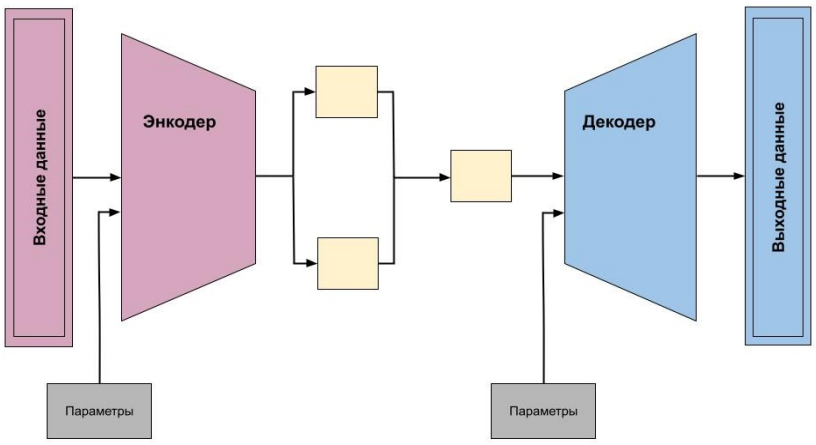


Рис. 1. Архитектура вариационного автоэнкодера

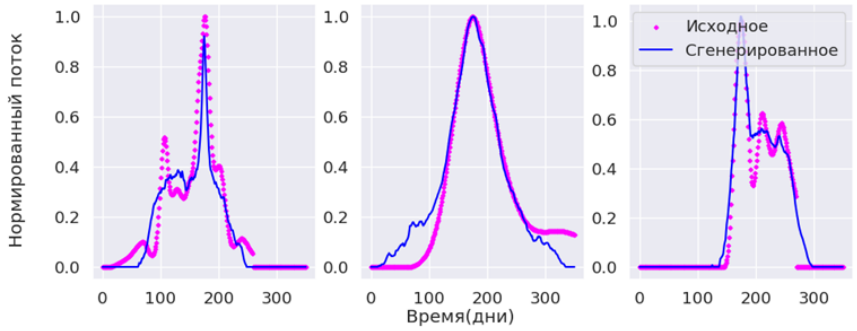


Рис. 2. Пример исходных вспышек и сгенерированных моделью (из валидационной выборки)

Получив обученную модель CVAE, мы можем быстро генерировать большое количество вспышек с любой комбинацией физических параметров. На рис. 3 представлены сгенерированные вспышки с различными значениями угла наклона джета к лучу зрения θ и фиксированными остальными параметрами. Видно, что соотношение центральной части и крыльев вспышки меняется при различных значениях θ. Использование сгенерированных таким образом кривых дополняет известную информацию о вспышках. Большое количество данных дает возможность сравнения характеристик разных типов вспышек с результатами физического моделирования. Мы планируем рассмотреть несколько простых моделей формирования гамма-вспышек в различных областях джетов: до и после зоны ускорения, внутри и снаружи области широких эмиссионных линий, а также вспышек в спиральных филаментах джета. Это позволит лучше изучить структурные особенности вспышек, понять какие параметры влияют на форму вспышки и какие механизмы приводят к их образованию.

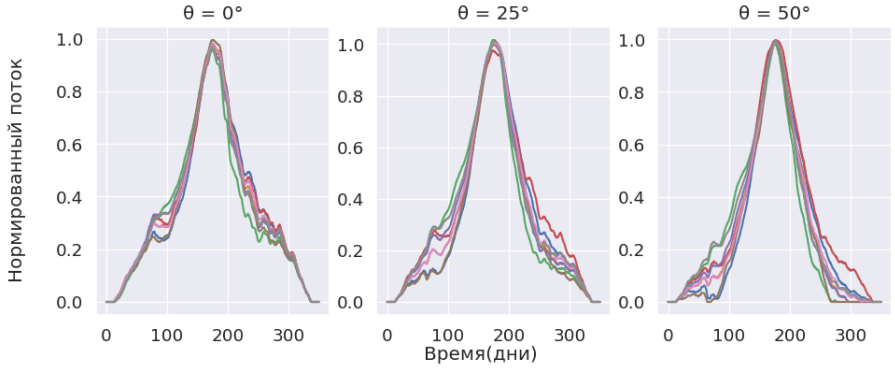


Рис. 3. Пример исходных вспышек, имеющих угол наклона джета к лучу зрения θ = 0; 25; 50; градусов. Остальные параметры фиксированы: красное смещение z = 0,9; фактор Доплера δ = 17,3; гамма фактор Γ = 19,3; продолжительность вспышки в системе отсчета источника = 240 дней

Литература

1. *Kramarenko I. G.* [et al.]. A decade of joint MOA decade of joint MOJAVE-Fermi AGN monitoring: localisation of the gamma-ray emission region // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2021. V. 510(1). P. 469–480. DOI: 10.1093/mnras/stab3358.
2. *Liodakis I.* [et al.]. Constraining the Limiting Brightness Temperature and Doppler Factors for the Largest Sample of Radio-bright Blazars // Astrophys. J. 2018. V. 866: 137. DOI: 10.3847/1538-4357/aae2b7.

УДК 520.646

Перспективный спектрометр электронов для миссии Венера-Д

***А. И. Петух*[1,2], *Д. А. Моисеенко*[1]**

[1]Институт космических исследований РАН
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Первые сведения о процессах взаимодействия солнечного ветра с атмосферой Венеры и формировании индуцированной магнитосферы были получены космическими аппаратами Венера-9 и Венера-10 [1]. Данные орбитального аппарата Pioneer-Venus подтвердили существование магнитного барьера и

плазменно-магнитного хвоста. Измерения, проведенные в рамках миссии Venus Express, дополнили предыдущие наблюдения [2]. Космическая миссия Венера-Д предназначена для комплексного изучения атмосферы, поверхности, внутреннего строения и плазменного окружения Венеры. В частности, можно отметить задачи по измерению параметров плазмы и магнитного поля для исследования тонких структур на границах магнитосферы и изучение процессов ускорения в токовых слоях.

Спектрометр электронов предназначен для исследования изменения характера взаимодействия солнечного ветра с Венерой в зависимости от флуктуаций солнечного ветра и межпланетной плазмы, корональных выбросах и изучения влияния солнечного ветра на характеристики ионосферы Венеры. Прибор является частью комплекса плазменных приборов проекта миссии Венера-Д. Структура спектрометра представляет собой модуль электроники и модуль электронной оптики. Электронно-оптическая схема состоит из тороидального электростатического анализатора и сканера, представлена на рис. 1.

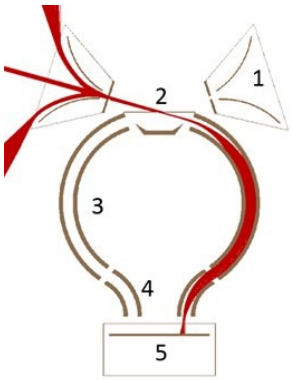


Рис. 1. Структура электронно-оптической схемы: *1* — угловой сканер; *2* — входная диафрагма-аттенюатор; *3* — тороидальный анализатор; *4* — корректирующие электроды; *5* — координатно-чувствительный детектор на основе микроканальных пластин

Было проведено моделирование в программе SIMION 8.1. Определены поля зрения, энергетическое разрешение, разрешение по полярному и азимутальному углу и геометрический фактор. Энергетическое разрешение составило 6,8%. Прибор имеет широкое поле зрения: ±65° по полярному углу и 360° по азимутальному и регистрирует электроны энергии 10 эВ–15 кэВ. Угловое разрешение для электронного спектрометра составило 10x20°. Геометрический фактор, полученный по результатам моделирования, составил $2{,}02*10^{-4}$ см^{2}ср (эВ/эВ).

Спектрометр электронов имеет характеристики, не уступающие аналогам, а по энергетическому разрешению их превосходит.

Литература

1. *Романов С. А., Смирнов В. Н., Вайсберг О. Л.* О природе взаимодействия солнечного ветра // Космические исследования. 1978. Т. 16. № 5. С. 746–756.
2. *Futaana Y* [et al.] Solar Wind Interaction and Impact on the Venus Atmosphere // Space Sci Rev. 2017. V. 212. P. 1453–1509. DOI: 10.1007/s11214-017-0362-8.

УДК 52-17, 520.622, 520.627

Моделирование и калибровка детектора СГС/Чибис-АИ для регистрации поляризации гамма-излучения

***А. А. Мкртчян*[1,2], *А. С. Позаненко*[1,2], *П. Ю. Минаев*[2], *А. О. Стрижак*[1,3], *А. П. Ивашкин*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт космических исследований РАН
[3]Институт ядерных исследований РАН

В работе проведены моделирование и экспериментальные калибровки регистрации поляризации гамма-излучения прототипом детектора СГС, разрабатываемого для микроспутника Чибис-АИ.

С помощью программного пакета Geant4 создана симуляция взаимодействия трех сцинтилляционных брусков из германата висмута (BGO) с линейно поляризованным излучением в линии 511 кэВ. Три

бруска BGO (17×17×60 мм^3) составляют Г-образную конфигурацию и представляют собой простейший комптоновский поляриметр, предназначенный для регистрации линейной поляризации гамма-излучения с помощью анизотропии комптоновского рассеяния [1]. В результате моделирования получено значение модуляционного фактора, характеризующего степень линейной поляризации падающего излучения в зависимости от угла рассеяния.

Также в работе проведена калибровка регистрации степени линейной поляризации с помощью экспериментальной установки в ИЯИ РАН. Установка состоит из двух плеч, между ними расположен источник коллимированных поляризованных аннигиляционных фотонов с энергией 511 кэВ от радиоактивного источника ^{22}Na [2]. Одно плечо включает в себя рассеиватель из пластикового сцинтиллятора и набор из 16 NaI(Tl) детекторов, расположенных по окружности на равном расстоянии от пластикового рассеивателя с целью определения угла поляризации аннигиляционного фотона. Другое плечо включает в себя 3 бруска BGO, из которых центральный брусок выполняет роль основного рассеивателя, а два боковых бруска дополняют центральный до комптоновского поляриметра. В результате эксперимента получено значение модуляционного фактора для исследуемой сборки.

В работе показано, что результаты моделирования с помощью Geant4 и эксперимента с достаточной точностью совпадают. Это позволяет сделать вывод, что моделирование является надежным инструментом, и в будущем его можно использовать вместо трудоемких натурных экспериментов.

Литература

1. *Kole M.* [et al.]. Gamma-Ray Polarization Results of the POLAR Mission and Future Prospects // 37th Intern. Cosmic Ray Conference (ICRC 2021). 12–23 July, Berlin, Germany. 2021. DOI: 10.22323/1.395.0600.
2. *Abdurashitov D.* [et al.]. Setup of Compton polarimeters for measuring entangled annihilation photons // Journal of Instrumentation. 2022. V. 17(03): P03010. DOI: 10.1088/1748-0221/17/03/P03010.

УДК 537.86/87

Резонансное взаимодействие электронов со свистовыми волнами как механизм передачи энергии между различными группами частиц

А. А. Лужковский, Д. Р. Шкляр

Институт космических исследований РАН

Проблема резонансного взаимодействия электронов радиационных поясов Земли со свистовыми волнами остается актуальной задачей в физике космической плазмы. Следствием резонансного взаимодействия между волной и частицами является обмен энергией между составляющими системы, при этом полная энергия сохраняется. В системе волна — резонансные частицы результатом резонансного взаимодействия может быть как возбуждение волн за счет энергии резонансных электронов, так и ускорение этих частиц волнами. Интегральный эффект воздействия резонансных частиц на волну определяется их функцией распределения f_R и выражается инкрементом волны γ в следующем виде [1]:

$$\gamma = \frac{e}{2U}\langle \int (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{E})\, f_R d^3v \rangle,$$

где $-e$ — заряд электрона, d^3v — элемент фазового объема в пространстве скоростей, $\boldsymbol{E}$ — электрическое поле волны, а U — плотность энергии квазимонохроматической свистовой волны, включающая в себя энергию электромагнитного поля и колебательную энергию нерезонансных частиц. При этом изменение кинетической энергии отдельной частицы, взаимодействующей резонансно с волной, не имеет определенного знака и может быть положительным для одних частиц и отрицательным для других. Таким образом, исследование проблемы энергетического обмена между составляющими системы в результате резонансного взаимодействия, которое ограничивается инкрементом волны, упускает из виду опосредованный волной механизм обмена энергией между различными популяциями электронов. Целью нашей работы является исследование дифференциального вклада в инкремент волны различных групп резонансных электронов в зависимости от их кинетической энергии, номера циклотронного резонанса и широты резонансного взаимодействия.

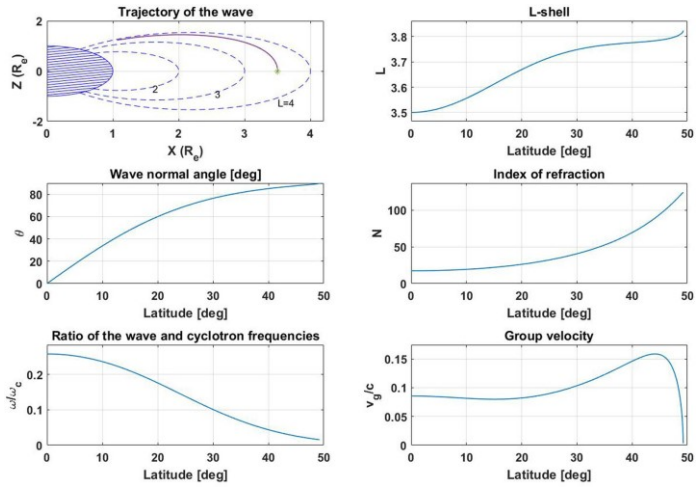
В нашей работе рассматривается квазимонохроматический пакет свистовых волн, который распространяется в магнитосфере Земли под углом к внешнему магнитному полю в соответствии с

уравнениями геометрической оптики. При данных условиях резонансное взаимодействие между электронами и волной реализуется на всех циклотронных резонансах ($v_{rn} = (\omega - n\omega_c)/k_{||}, n = 0, \pm1, \pm2, ...$) [1], однако мы исследуем три наиболее эффективных резонанса, вносящих основной вклад в инкремент свистовой волны: $n = 1$ (первый циклотронный резонанс), $n = 0$ (резонанс Ландау) и $n = -1$. Мы полагаем, что квазимонохроматический пакет свистовых волн генерируется из теплового шума посредством резонансного взаимодействия с неустойчивым распределением энергичных электронов на экваторе на L-оболочке 3.5. Для расчета лучевой траектории в земной магнитосфере выбирается фиксированная частота волнового пакета $f = 5.2$ кГц и начальный угол волновой нормали ($\theta = 0°$), соответствующие максимальному значению линейного инкремента. Предполагается, что такой волновой пакет будет доминировать над другими неустойчивыми волнами за счет экспоненциального роста амплитуды волны. Траектория луча рассчитывается вплоть до НГР отражения [2] в приближении электрон-протонной плазмы, дипольного магнитного поля Земли и гиротропной модели плотности холодной плазмы $\omega_p^2 \sim \omega_c$. На рис.1 представлена траектория волнового пакета на меридиональной плоскости и некоторые параметры волны вдоль лучевой траектории. Амплитуда волнового пакета вдоль траектории определяется в соответствии с законом сохранения энергии, который в стационарном случае $\partial U/\partial t = 0$ имеет вид:

$$\frac{dD}{ds} = 2\frac{\gamma}{v_g}D,$$

где s — длина вдоль траектории волнового пакета, $D = \sigma v_g U \sim |E|^2$, σ — поперечное сечение лучевой трубки, v_g — групповая скорость волны. Для генерируемого из теплового шума волнового пакета малой амплитуды условие сильной неоднородности реализуется вдоль почти всей траектории луча, кроме узкой приэкваториальной области. Случай сильной неоднородности для квазимонохроматического волнового пакета представляет собой редкий случай, когда система уравнений Больцмана-Власова-Максвелла может быть решена самосогласованно, поскольку нелинейный инкремент волны может быть выражен через ее локальную амплитуду. На рис. 2 представлен результат самосогласованного решения системы уравнений Больцмана-Власова — Максвелла вдоль траектории волнового пакета.

Детальный анализ рассчитанного нелинейного инкремента вдоль траектории волнового пакета показал, что свистовая волна возбуждается электронами первого циклотронного резонанса вблизи экватора и затухает на средних и высоких широтах преимущественно вследствие взаимодействия с электронами Ландау резонанса. Произведенные оценки среднеквадратичного и среднего изменения энергии резонансных электронов на широте 15° показали большую эффективность процесса обмена энергией между различными популяциями электронов, в котором волна играет роль посредника, по сравнению со средним обменом энергией между частицами и волной.



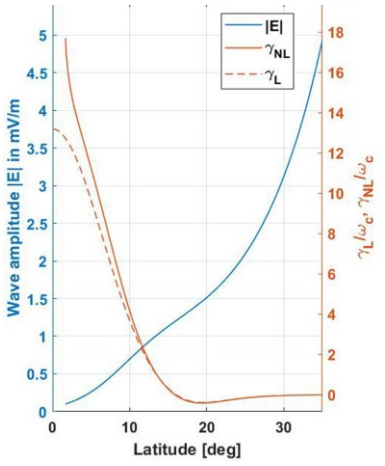


Рис. 1. Лучевая траектория волнового пакета в магнитосфере и параметры волны вдоль траектории

Рис. 2. Нелинейный инкремент (оранжевая сплошная линия), линейный инкремент (оранжевая пунктирная линия) и амплитуда электрического поля (синяя линия) вдоль лучевой траектории

Литература

1. *Shklyar, D., Matsumoto, H.* Oblique Whistler-Mode Waves in the Inhomogeneous Magnetospheric Plasma: Resonant Interactions with Energetic Charged Particles // Surv. Geophys. 2009. V. 30. P. 55–104.
2. *Kimura, I.* Effects of Ions on Whistler-Mode Ray Tracing // Radio Science 1966. V. 1. P. 269–284.

УДК 524.7

Восстановление профиля концентрации излучающей плазмы в релятивистском стратифицированном джете

***В. А. Фролова*[1], *Е. Е. Нохрина*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Релятивистские струйные выбросы (джеты) — это течения замагниченной плазмы из окрестностей сверхмассивных черных дыр в ядрах активных галактик [1]. Наблюдения в высоком разрешении показывают выраженную двух- или трехгорбую структуру интенсивности излучения и спектрального индекса для джета в галактике M87 [2–4]. Этот эффект может быть связан с рядом факторов: это (i) бустинг и дебустинг излучения от различных частей джета; (ii) пространственное распределение излучающих частиц, которое может возникать благодаря развитию неустойчивостей [5–8], ускорению плазмы на областях с большим градиентом скоростей [9, 10], Омическому нагреву или равнораспределению магнитной и кинетической энергии [11]; (iii) неоднородная структура джета; (iv) эффекты оптической толщи [12]. Многие из этих факторов могут присутствовать одновременно [13]. В работе [14] мы использовали полуаналитические магнитогидродинамические модели джета — с постоянной угловой скоростью [15] и с полным замыканием тока внутри джета [16], — чтобы исследовать роль стратифицированной структуры джета в формировании уярчения к краю. Мы получили, что двугорбые профили возникают в моделях с высоким максимальным лоренц-фактором или в оптически толстых джетах, и трехгорбые профили ограничивают долю излучающих частиц в джете; в предпочтительных моделях нетепловые электроны локализованы на краях джета или распределены согласно Омическому нагреву.

В этой работе мы предлагаем метод восстановления радиального профиля концентрации излучающей плазмы по наблюдаемому поперечному профилю интенсивности излучения.

Для построения профилей интенсивности мы решаем уравнение переноса излучения [17]

$$\frac{dI_\nu}{ds} = j_\nu - k_\nu I_\nu,$$

где I_ν — спектральная интенсивность излучения, j_ν и k_ν — спектральные коэффициенты излучения и поглощения, ν — частота наблюдения, координата s параметризует луч, вдоль которого осуществляется наблюдение. В областях высоких частот, при которых джет оптически прозрачен, поглощение мало и им можно пренебречь. Будем далее пользоваться этим приближением.

Коэффициент излучения в системе отсчета плазмы имеет вид

$$j'_\nu = n'\,\alpha\big(p,\,\sigma_{\mathrm{M},}\Psi_0,\,R_{\mathrm{L}}\big)B_\perp'^{\frac{p+1}{2}}\,\nu'^{\frac{1-p}{2}},$$

где n' и $B'_\perp$ — безразмерные концентрация и компонента магнитного поля, перпендикулярная волновому вектору, в системе отсчета плазмы, α — численный размерный коэффициент, зависящий в том числе от параметров модели оптически прозрачного спектрального индекса p , начальной замагниченности σ_{M}, полного магнитного потока Ψ_0, радиуса светового цилиндра R_{L}. В систему отсчета наблюдателя коэффициент пересчитывается с использованием Лоренц-инварианта [17]. Введем для удобства коэффициент излучения j^*_ν, сокращенный на концентрацию n' и коэффициент α:

$$j'_\nu = n'\,\alpha\, j^*_\nu.$$

Будем искать профиль концентрации излучающей плазмы в виде

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} n_i\ \chi\Big\{r \in \Big[\frac{R}{N}(i-1),\,\frac{R}{N}i\Big]\Big\},$$

где R — радиус джета, χ — индикаторная функция, r — радиальная координата. Рассмотрим поперечную координату $x \in \Big[-\frac{R}{N},\ -\frac{R}{N}(N-1)\Big]$ и обозначим $s_i^k = -\frac{\sqrt{\left(\frac{R}{N}k\right)^2 - x^2}}{\sin\ \theta}$, $s_f^k = \frac{\sqrt{\left(\frac{R}{N}k\right)^2 - x^2}}{\sin\ \theta}$. Будем использовать магнитное поле и поле скоростей, предсказываемые полуаналитическими моделями [15, 16]. Наблюдаемую интенсивность излучения для таких x представим в виде

$$I_{\mathrm{obs}\,\nu}(x) = n_N\ \alpha \int_{s_i^N}^{s_f^N} j^*_\nu(x,\,s)ds,$$

откуда получаем значение $n_N\ \alpha$. Теперь рассмотрим $x \in \left[-\frac{R}{N}(N-1),\ -\frac{R}{N}(N-2)\right]$. Для таких x

$$I_{\mathrm{obs}\,\nu}(x) = n_N\ \alpha\left(\int_{s_i^N}^{s_i^{N-1}} + \int_{s_f^{N-1}}^{s_f^N}\right) j_\nu^*(x,\, s)ds\ +\ n_{N-1}\,\alpha\int_{s_i^{N-1}}^{s_f^{N-1}} j_\nu^*(x,\, s)ds,$$

что позволяет выразить $n_{N-1}\ \alpha$. Повторяя описанные шаги, мы получаем полный качественный профиль концентрации излучающей плазмы, так как нормировка исключает коэффициент α. Также профиль концентрации может быть восстановлен при рассмотрении $x \in \left[\frac{R}{N}(N-1),\ \frac{R}{N}\right]$, $x \in \left[\frac{R}{N}(N-2),\ \frac{R}{N}(N-1)\right]$ и т. д. Эти профили неодинаковы, и их необходимо анализировать совместно.

Восстановленный профиль излучающей концентрации является модельно зависимым, так как магнитное поле и поле скоростей зависят от параметров модели: начальной замагниченности джета и безразмерной ширины джета, выраженной в радиусах светового цилиндра. Поэтому для анализа распределения излучающих частиц необходимо рассмотрение профилей концентрации, восстановленных для ряда возможных значений модельных параметров. Также необходимо учесть, что наблюдаемые профили интенсивности излучения получены с использованием свертки данных с диаграммой направленности, что искажает предсказываемый профиль концентрации. Тем не менее это искажение носит систематический характер. Наконец, хотя восстановленная концентрация является существенно безразмерной, для оценки коэффициента α и оразмеривания концентрации и магнитного поля возможно использовать дополнительные данные, например, оценки мощности джета W_{jet}, так как она связана с полным магнитным потоком [18]:

$$W_{\mathrm{jet}} = \frac{c}{8}\left(\frac{\Psi_0}{\pi R_{\mathrm{L}}}\right)^2.$$

Восстановление качественного профиля излучающей плазмы позволит в дальнейшем более детально изучить механизмы нагрева плазмы, отвечающие за формирование такого пространственного распределения излучающих частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 20-72-10078.

Литература

1. *Blandford R., Meier D., Readhead A.* Relativistic Jets from Active Galactic Nuclei // ARA&A. 2019. V. 57. P. 467–509.
2. *Mertens F.* [et al.]. Kinematics of the jet in M 87 on scales of 100-1000 Schwarzschild radii // A&A. 2016. V. 595: A54.
3. *Hada K.* The Structure and Propagation of the Misaligned Jet M87 // Galaxies. 2017. V. 5(1): 2.
4. *Kim J.-Y.* [et al.]. The limb-brightened jet of M87 down to the 7 Schwarzschild radii scale // A&A. 2018. V. 616: A188.
5. *McKinney J. C.* General relativistic magnetohydrodynamic simulations of the jet formation and large-scale propagation from black hole accretion systems. // MNRAS. 2006. V. 362. P. 1561–1582.
6. *Chatterjee K., Liska M., Tchekhovskoy A., Markoff S.B.* Accelerating AGN jets to parsec scales using general relativistic MHD simulations. // MNRAS. 2019. V. 490. P. 2200 — 2218.
7. *Hardee P. E., Eilek J. A.* Using twisted filaments to model the inner jet in M87. // ApJ. 2011. V. 735:61.
8. *Nikonov A. S.* [et al.]. Properties of the jet in M87 revealed by its helical structure imaged with the VLBA at 8 and 15 GHz // MNRAS. 2023. V. 526. P. 5949–5963.
9. *Ostrowski M.* Diffusive acceleration of cosmic ray particles at tangential discontinuity of velocity field. // A&A. 1990. V. 238. P. 435–438.
10. *Ostrowski M.* Acceleration of ultra-high energy cosmic ray particles in relativistic jets in extragalactic radio sources // A&A. 1998. V. 335. P. 134–144.
11. *Lyutikov M., Pariev V. I., Gabuzda D. C.* Polarization and structure of relativistic parsec-scale AGN jets // MNRAS. 2005. V. 360. P. 869–891.
12. *Zakamska N. L., Begelman M. C., Blandford R. D.* Hot Self-Similar Relativistic Magnetohydrodynamic Flows // ApJ. 2008. V. 679. P. 990–999.
13. *Gabuzda D.* Inherent and Local Magnetic Field Structures in Jets from Active Galactic Nuclei // Galaxies. 2021. V. 9: 58.
14. *Frolova V. A., Nokhrina E. E., Pashchenko I. N.* Synchrotron intensity plots from a relativistic stratified jet // MNRAS. 2023. V. 523. P. 887–906.
15. *Lyubarsky Y.* Asymptotic Structure of Poynting-Dominated Jets. // ApJ. 2009. V. 698. P. 1570–1589.
16. *Beskin V.* [et al.]. On the internal structure of relativistic jets collimated by ambient gas pressure // MNRAS. 2017. V. 472. P. 3971–3978.
17. *George B. Rybicki, Alan P. Lightman*. Radiative Processes in Astrophysics. — Weinheim: Wiley, 2004.
18. *Nokhrina E. E.* The correlation between the total jet power and the Poynting flux at the jet base // Proceedings of the International Astronomical Union. Symposium S342: Perseus in Sicily: From Black Hole to Cluster Outskirts. 2018. V. 14. P. 197–200.

УДК 523.42

Исследование оптических и микрофизических свойств аэрозоля надоблачной дымки Венеры по данным спектрометра СУАР

***А. Р. Непоп*[1,2], *М. С. Лугинин*[2], *А. А. Федорова*[2], *О. И. Кораблев*[2]**

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

Венера покрыта толстым слоем облаков, которые простираются от 48 до 70 км; над облаками располагается тонкий слой надоблачной дымки. На верхней границе облаков частицы являются сферическими и состоят из водного раствора серной кислоты [1]. Исследования, проведенные с помощью орбитальных аппаратов «Венера-9», «Венера-10» и «Пионер–Венера» выявили наличие субмикронных частиц в этой области. Существование второй моды (микронных частиц) распределения частиц аэрозоля надоблачной дымки по размерам было показано в результате анализа нескольких наблюдений прибора СПИКАВ/СУАР с борта космического аппарата (КА) «Венера Экспресс», выполненных в геометрии солнечного просвечивания [2]. Были обнаружены временные вариации коэффициента аэрозольного ослабления на промежутках порядка нескольких дней по данным ≈200 наблюдений, выполненных в период с сентября 2006 по сентябрь 2010 года [3]. В работе [4] были изучены >200 наблюдений СПИКАВ −ИК, выполненных в диапазоне от 0,7 до 1,7 мкм за все время работы КА «Венера Экспресс» (2006–2014 гг.). В результате было показано существование второй моды распределения частиц аэрозоля надоблачной дымки по размерам на высотах 75–85 км, восстановлены вертикальные профили эффективного радиуса и концентрации аэрозольных частиц. В данной работе для восстановления микрофизических свойств аэрозолей надоблачной дымки используются данные прибора СУАР (SOIR).

СУАР (SOIR — Solar Occultation in the IR) — это небольшой и легкий ИК-спектрометр высокого разрешения, установленный на борту КА «Венера Экспресс», обладающий рабочим диапазоном длин волн от 2,32 мкм до 4,25 мкм. За все время работы СУАР провел более 700 сеансов измерений методом солнечного просвечивания. Однако, чтобы восстановить микрофизические свойства аэрозоля, измерения должны быть выполнены в достаточно широком диапазоне длин волн с высоким вертикальным разрешением. Всего было отобрано 111 наблюдений, удовлетворяющих данным критериям.

Архив с данными измерений СУАР включает в себя несколько спектров пропускания. Предполагается, что солнечное излучение, прошедшее через атмосферу, подчиняется закону Бугера-Ламберта-Бера. Значение оптической толщины определяется из величины коэффициента пропускания: $\tau(\lambda, L) = -\ln\left(\frac{I(\lambda,z)}{I_0(\lambda)}\right)$. Рэлеевское рассеяние и атмосферная рефракция не оказывают существенного влияния на спектры СУАР. Для восстановления высотных профилей коэффициента ослабления аэрозоля применяется алгоритм «очистки луковицы» [5]. Было проведено сравнение полученных результатов с работой [2] (рис. 1). Наблюдаемые расхождения могут быть объяснены использованием различных версий архива откалиброванных измерений.

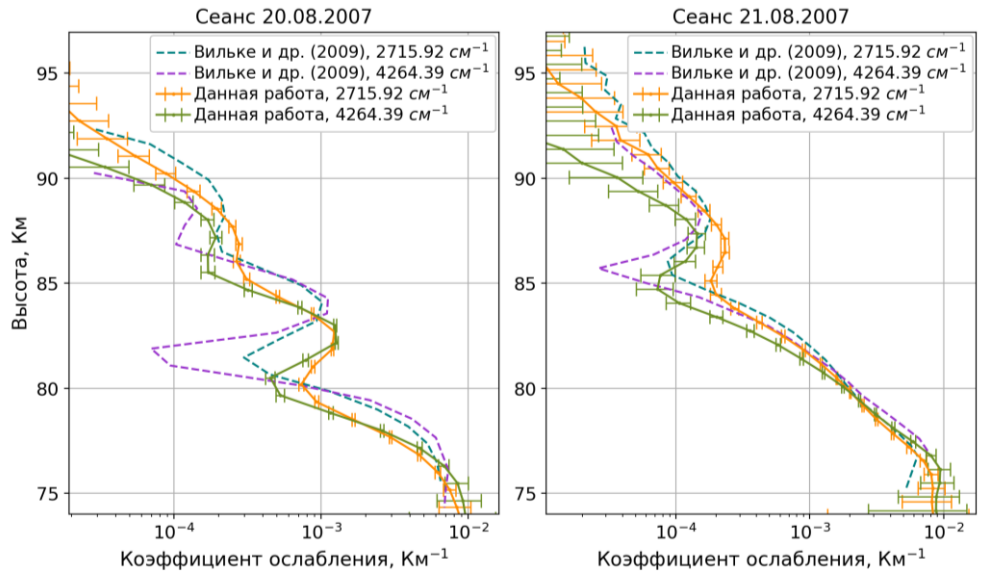


Рис. 1. Высотные профили коэффициента ослабления, восстановленные методом «очистки луковицы»

При моделировании коэффициента ослабления ансамбля аэрозольных частиц использовались одномодовые и двухмодовые логарифмически нормальные функции распределения. Сечения ослабления ансамбля частиц вычислялись согласно теории Ми с помощью программы на языке Fortran, реализованной в рамках работы [6]. Были использованы значения показателя преломления раствора серной кислоты концентрации 75% при температуре 215 К [7]. Для восстановления параметров распределения аэрозольных частиц по размерам была реализован алгоритм на языке программирования Python. Он решает задачу оптимизации для функции χ^2 с помощью алгоритма SLSQP.

Для большинства измерений использование двухмодовой функции распределения лишь незначительно улучшает качество аппроксимации экспериментальных данных. Однако было показано, что учет второй моды позволяет значительно точнее приблизить экспериментальные данные для некоторых измерений (рис. 2). Полученные значения эффективного радиуса варьируются от ≈3 до ≈0,1 мкм. Радиус одной из мод в двухмодовой модели распределения зачастую близок к радиусу одномодовой модели.

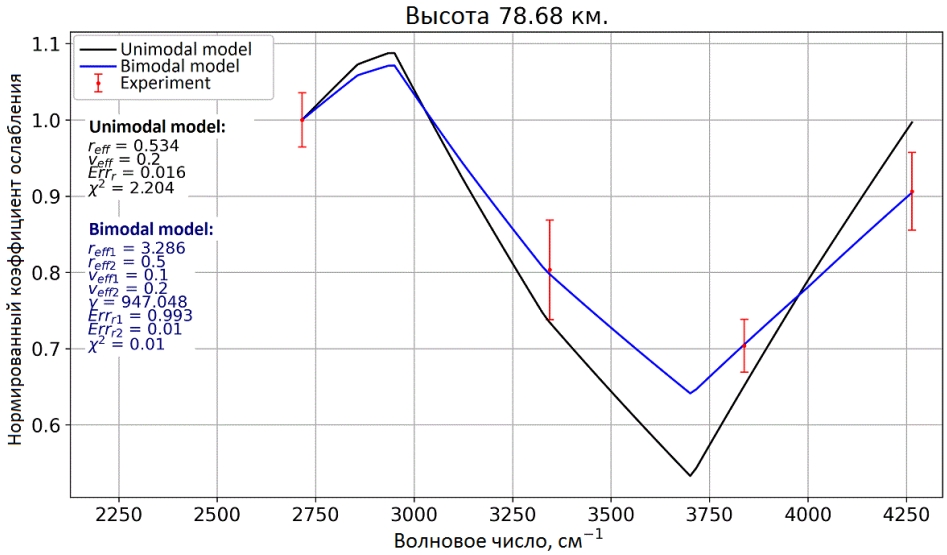


Рис. 2. Нормированный коэффициент ослабления для одномодовой (черный), двухмодовой (синий) моделей и экспериментальные значения (красный). Наблюдение 2007.08.20. Высота 78,68 км. Для данного измерения двухмодовая модель приближает экспериментальные данные значительно более точно

Литература

1. *Esposito L.* [et al.]. The clouds and hazes of Venus // Venus. 1983. V. 484. P. 484–564.
2. *Wilquet V.* [et al.]. Preliminary characterization of the upper haze by SPICAV/SOIR solar occultation in UV to mid-IR onboard Venus Express // J. Geophys. Res. 2009. V. 114: E00B42.
3. *Wilquet V.* [et al.]. Optical extinction due to aerosols in the upper haze of Venus: Four years of SOIR/VEX observations from 2006 to 2010 // Icarus. 2012. V. 217. P. 875–881.
4. *Luginin M.* [et al.]. Aerosol properties in the upper haze of Venus from SPICAV IR data // Icarus. 2016. V. 277. P. 154–170.
5. *Rogers C.* Invers methods for atmospheric sounding. Theory and practice. — Singapore: World Scientific, 2000.
6. *Mishchenko M.* [et al.]. Bidirectional reflectance of flat, optically thick particulate layers: an efficient radiative transfer solution and applications to snow and soil surfaces // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1999. V. 63. P. 409–432.
7. *Hummel J., Shettle E., Longtin D.* A New Background Stratospheric Aerosol Model for Use in Atmospheric Radiation Models. — Hanscom Air Force Base, Massachusetts: Air Force Geophys. Lab., 1988.

УДК 524.64

Наблюдения центрального звездного диска Млечного Пути в рентгеновских лучах по данным телескопа ART-XC им. Павлинского обсерватории СРГ

***В. О. Незабудкин*[1,2], *Р. А. Кривонос*[2]**

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

Центральный Звездный Диск (ЦЗД) вместе с Центральным Звездным Скоплением (ЦЗС) и сверхмассивной черной дырой Стрелец А* формируют центральную область Млечного Пути. В 2006 году был произведен анализ излучения рентгеновского фона Галактики в диапазоне 3–20 кэВ [1], который кардинально изменил представление о его происхождении. В этой работе была получена линейная связь светимости и звездной массы для хребта Галактики (более масштабной структуры Галактики, чем ЦЗД), а также описан процесс формирования интегрального излучения аккрецирующими белыми карликами.

В нашей работе рассматривается рентгеновское излучение ЦЗД в диапазоне 4–12 кэВ, которое было получено телескопом ART-XC им. Павлинского обсерватории Спектр-РГ (СРГ) [2]. Целью исследования является получение коэффициента линейной связи массы звездного населения и рентгеновской интенсивности излучения ЦЗД в галактическом центре. Это позволит изучить свойства ЦЗД в общей картине рентгеновского излучения хребта Галактики и свойств звездного населения окрестности Солнца, на расстоянии несколько сотен пк [3], что позволит укрепить теорию формирования рентгеновского фона Галактики.

В работе были воспроизведены известные 3D-модели распределения звездной массы [4, 5], которые в ходе интегрирования по лучу зрения были поделены на $4\pi r^2$, где r — расстояние до элемента объема. Данную величину мы назвали приведенной массой μ ($M_\odot * \text{см}^{-2}$). Такая необходимость обусловлена размерностью наблюдаемого рентгеновского потока излучения ($\text{эрг} * \text{с}^{-1} * \text{см}^{-2}$). Отношение потока к приведенной массе будет отражать удельную светимость ЦЗД на единицу звездной массы ($\text{эрг} * \text{с}^{-1} * M_\odot^{-1}$).

Рентгеновское излучение исследуемой области формируется суммарным излучением нескольких известных компонент: галактического хребта (балджа и диска), а также ЦЗД и ЦЗС. В ходе анализа данных возникла необходимость исключить из карты фон частиц и влияние ярких рентгеновских источников, излучение которых формируется иным путем и никак не связано с объектами нашего изучения. Таким образом, в нашем распоряжении находятся карты модели распределения звездной массы и рентгеновского излучения, формируемого рассматриваемым звездным населением. Следующим шагом работы является разбиение карт на интервалы по удалению от сверхмассивной черной дыры, в которых мы будем искать среднее значение потока излучения и приведенной массы.

В результате проведенной работы была получена зависимость потока рентгеновского излучения и приведенной массы, что эквивалентно зависимости рентгеновской светимости от звездной массы. Все величины нормированы на телесный угол. Полученное значение удельной рентгеновской светимости единицы звездной массы в диапазоне 4–12 кэВ для ЦЗД хорошо согласуется с результатами работ [1, 3], в которых были получены аналогичные величины соответственно для галактического хребта и окрестности Солнца.

Литература

1. *Revnivtsev M.* [et al.]. Origin of the Galactic ridge X-ray emission // Astronomy and Astrophysics. 2006. V. 452. P. 169–178.
2. *Sunyaev R.* [et al.]. SRG X-ray orbital observatory — Its telescopes and first scientific results // Astronomy and Astrophysics. 2021. V. 656 (A132). P. 29.
3. *Sazonov S.* [et al.]. X-ray luminosity function of faint point sources in the Milky Way // Astronomy and Astrophysics. 2006. V. 450. P. 117–128.
4. *Launhardt R.* [et al.]. The nuclear bulge of the Galaxy. III. Large-scale physical characteristics of stars and interstellar matter // Astronomy and Astrophysics. 2002. V. 384. P. 112–139.
5. *Sormani M. C.* [et al.]. Jeans modelling of the Milky Way's nuclear stellar disc // Royal Astronomical Society. 2020. V. 499. I. 1. P. 7–24.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Начальное распределение магнитных углов классических радиопульсаров

***Е. А. Токарева*[1], *А. В. Бирюков*[2]**

[1]Институт космических исследований РАН
[2]Государственный астрономический институт им. П. К. Штернберга

Классические радиопульсары — это сравнительно молодые одиночные нейтронные звезды, находящиеся на стадии эжектора. Их магнито-вращательная эволюция не зависит от свойств межзвездной среды, в которой они находятся и определяется только процессами, протекающими внутри их магнитосфер.

Основной наблюдаемый параметр, характеризующий вращение пульсара — это период вращения P. С течением времени пульсар теряет энергию своего вращения и замедляется. При этом темп замедления вращения $\dot{P}$, зависит не только от величины самого периода, но также от величины магнитного момента нейтронной звезды μ и его ориентации к оси вращения [1]. Последняя характеризуется так называемым магнитным углом α — между осью вращения и магнитной осью.

Магнитный угол также является наблюдаемой величиной. Несмотря на то, что измерение магнитного угла — модельно зависимая процедура, результаты разных методов тем не менее оказываются вполне согласованными, как минимум в смысле совпадения распределений магнитных углов по всей популяции пульсаров [2, 3].

Целью этой работы является получение эмпирического распределения α_0 одиночных радиопульсаров, исходя из их текущих значений, независимых оценок их возрастов и выбранной модели эволюции.

Для расчета начального значения магнитного угла пульсара необходимо знать его значение в настоящий момент времени $\alpha = \alpha(t)$, где t — возраст пульсара. В качестве источника значений текущих углов мы используем оценки, полученные в работах [4,5]. Эти оценки были сделаны для большого количества объектов. В первом случае — на основании анализа формы профилей средних импульсов пульсаров, а во-втором на основании свойств поляризации их излучения.

Что касается возрастов пульсаров, то последние годы появились несколько работ, предлагающих соответствующие оценки, независящие от значений их периода и производной периода. Так, возраст пульсара возможно оценить либо возрасту остатка сверхновой, связанного с пульсаром, либо по его движению в Галактике — так называемый кинематический возраст. Последний представляет собой время, которое пульсару потребовалось, чтобы перелететь в гравитационном поле Галактики от места своего рождения (в плоскости Галактики) до текущего положения. Из работ [6,7] мы взяли значения кинематических возрастов для 81 пульсара. Из них 35 объектов совпали со списком тех пульсаров, для которых известно значение магнитного угла.

Последний компонент модели — модель эволюции вращения пульсара. Она связывает темп замедления $\dot{P}$, период P, магнитный момент μ и угол α. В нашей работе мы используем модель, полученную на основе численного моделирования магнитосфер одиночных нейтронных звезд [8,9]. Эта модель предсказывает эволюционное уменьшение магнитного угла ($\dot{\alpha} < 0$) на характерном времени порядка времени замедления самого пульсара. А именно:

$$P\dot{P} = b^2\,(1 + x) \text{ и } P^2\,\dot{x} = -2b^2x(1 - x),$$

соответственно, где $x = \sin^2\alpha$, $b(t) = 2\pi B(t)\sqrt{K}$ — величина, пропорциональная магнитному полю B на поверхности НЗ, а K — размерная константа, одинаковая для всех пульсаров. При этом мы считаем, что магнитное поле меняется со временем по закону вида:

$$b(t) = b_0\left(1 + \frac{t}{\tau_m}\right)^{-\beta},$$

в котором β и t_m являются свободными параметрами.

Определение α_0 сводится к прослеживанию эволюции пульсара назад во времени на время t. Для каждого из 35 пульсаров мы рассчитали α_0 и P_0 . Все расчеты проводились для двух случаев: постоянного магнитного поля ($\beta = 0$ и, следовательно, $b = b_0 = const$) и сравнительно быстро меняющегося поля ($\beta = 0.2$, $\tau_m = 10^5$ лет).

В результате начальные магнитные углы пульсаров оказываются систематически больше 45 градусов. При этом как включение в модель эволюции поля, так и попытка учесть геометрический эффект

селекции, приводят к увеличению объектов с большими начальными углами. Из полученных результатов можно сделать вывод, что наблюдаемые нейтронные звезды очень редко рождаются выровненными ротаторами и что их магнитные оси скорее оказываются ориентированными ближе к магнитному экватору. Для того, чтобы охарактеризовать распределение α_0 мы сравнили его статистически с двумя модельными распределениями -- однородным ($p(\alpha_0) = const$) и изотропным ($p(\alpha_0) \propto \sin \alpha_0$). Для сравнения мы воспользовались критерием типа критерия Пирсона χ^2 (рис. 1).

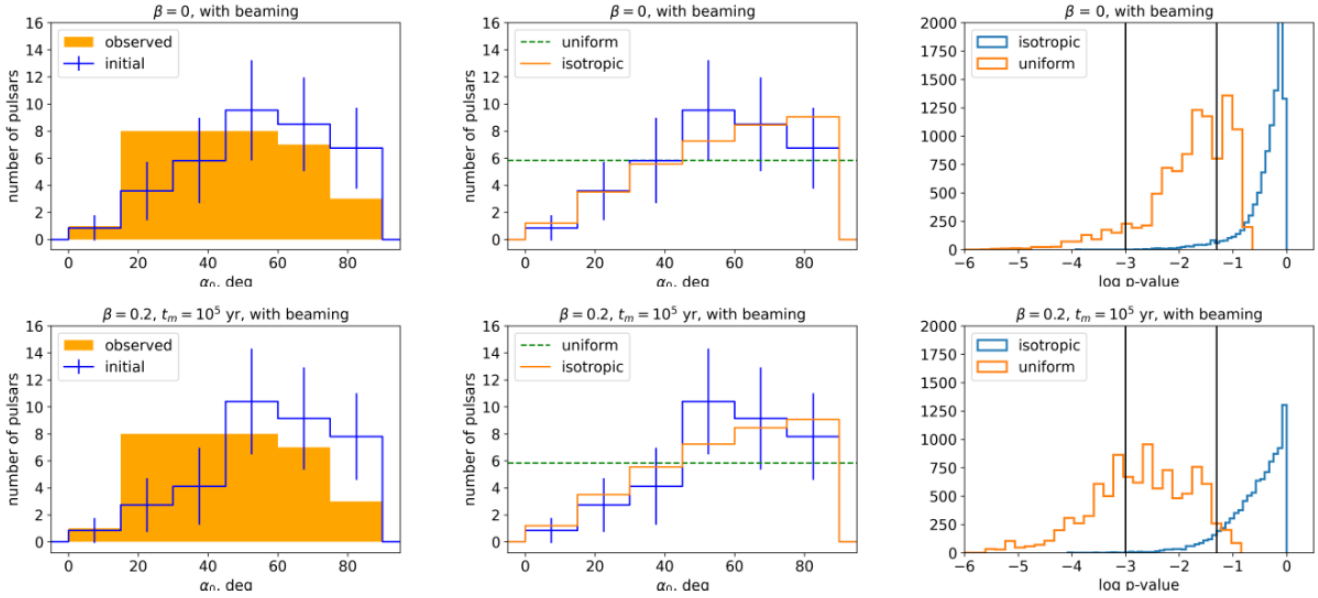


Рис. 1. На графиках в левой колонке сплошным желтым цветом показано распределение наблюдаемых (текущих) углов радиопульсаров, синим — найденное начальное распределение; в средней колонке аналогично синим показано распределение начальных магнитных углов, зеленым пунктиром — модельное равномерное распределение, желтым — модельное изотропное распределение; в правой колонке графики показывают распределения соответствующих p-значений для сравнения полученного распределения α_0 и двух модельных, вертикальными линиями отмечены уровни значимости 10^{-3} и 0.05. Подпись «with beaming» означает учет эффектов наблюдательной селекции при построении данных распределений

В итоге мы делаем вывод, что распределение начальных магнитных углов одиночных радиопульсаров скорее близко к изотропному. Это согласуется с выводом, сделанным в [10] о том, что именно при изотропном распределении α_0 модель замедления вида успешно описывает статистику пульсаров с интеримпульсами.

Литература

1. *Beskin V. S.* Radio pulsars — already fifty years! // Phys. Usp. 2018. V. 61 P. 353–380.
2. *Tauris T. M., Manchester R. N.* On the Evolution of Pulsar Beams // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 1998. V. 298. P. 625–636.
3. *Malov I. F., Nikitina E. B.* VizieR Online Data Catalog: Geometry of radio pulsar magnetospheres // Ast. Zh. 2011. V. 88. P. 954–965.
4. *Rankin J. M.* Toward an Empirical Theory of Pulsar Emission // Astrophysical Journal Supplement. 1993. V. 85. P. 145–161.
5. *Lyne A. G.*, *Manchester R. N.* The shape of pulsar radio beams // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 1988. V. 234. P. 477–508.
6. *Igoshev A. P.* Ages of radio pulsar: long-term magnetic field evolution // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 2019. V. 482. P. 3415–3425.
7. *Noutsos A.* [et al.]. Pulsar spin–velocity alignment: kinematic ages, birth periods and braking indices // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 2013. V. 430. P. 2281–2301.
8. *Spitkovsky A.* Time-dependent Force-free Pulsar Magnetospheres: Axisymmetric and Oblique Rotators // The Astrophysical Journal. 2006. V. 648(1). P. L51– L54.
9. *Philippov A.,* [et al.]. Time evolution of pulsar obliquity angle from 3D simulations of magnetospheres // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 2014. V. 441. P. 1879–1887.
10. *Novoselov E. M.* [et al.]. Orthogonal pulsars as a key test for pulsar evolution // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 2020. V. 494. P. 3899–3911.

УДК 524.354.4

Вычисление ускоряющего потенциала и профиля плотности плазмы в магнитосфере ортогональных пульсаров

***А. Ю. Истомин*[1,2], *Ф. А. Князев*[1,2], *В. С. Бескин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Корректный анализ наблюдаемых средних профилей интенсивности и поляризации радиопульсаров невозможен без учета эффектов распространения излучения в магнитосфере [1], таких как рефракция, циклотронное поглощение и предельная поляризация. Для их исследования необходимо иметь количественную модель распределения плотности вторичной электрон-позитронной плазмы, истекающей вдоль открытых силовых линий радиопульсара. Так как, согласно большинству моделей, основным механизмом генерации вторичной плазмы является ускорение первичных электронов и последующее излучение ими изгибных фотонов, для построения соответствующей модели необходимо знать трехмерную структуру ускоряющего потенциала в области над полярной шапкой нейтронной звезды. Хотя классическая модель вакуумного зазора [2] и служит хорошей отправной точкой для решения данной задачи, в своей традиционной формулировке она содержит существенную неопределенность: длины свободных пробегов фотонов, а следовательно, и геометрия вакуумного зазора сама зависит от длины пробега фотонов. Поэтому фактически она может построена только для достаточно быстрых радиопульсаров, у которых высота зазора много меньше радиуса полярной шапки. Тем более эту модель нельзя использовать для почти ортогональных пульсаров.

В данной работе предлагается способ корректной постановки и решения данной задачи, не предполагающий малость высоты зазора по сравнению с радиусом полярной шапки и осесимметричность потенциала, что делает метод применимым для рассмотрения интеримпульсных ортогональных пульсаров.

Уравнение, определяющее потенциал $\psi(r_m, \varphi_m, z)$в вакуумной области, в цилиндрических координатах имеет следующий вид (здесь и далее r_m и z нормированы на радиус полярной шапки, если не оговорено обратное):

$$\frac{1}{r_m}\frac{\partial}{\partial r_m}\left(r_m\frac{\partial\psi}{\partial r_m}\right)+\frac{1}{r_m^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi_m^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-2K_\psi\frac{\Omega B_0R_0^2}{c}\left(cos\ \chi+\frac{3}{2}\frac{r_m}{R}sin\ \chi sin\ \varphi_m\right),$$

где Ω — угловая скорость вращения звезды, R_0— радиус полярной шапки, R — радиус звезды. Фактор $K_\psi=\frac{\left(1-\frac{\omega}{\Omega}\right)}{\left(1-\frac{r_g}{R}\right)}$, где $r_g=2\frac{GM}{c^2}$ и $\frac{\omega}{\Omega}=I_r\frac{r_g}{MR^3}$, учитывает эффекты ОТО.

Если высоту зазора $H_{gap}=H_{gap}(r_m,\varphi_m)$ считать заданной функцией, то граничными условиями для этого уравнения будут являться:

$$\psi(r_m,\varphi_m,z=0)\ =0,$$

$$\psi(r_m=1,\varphi_m,z)\ =0,$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial z}(r_m,\varphi_m,z)|_{z=H_{gap}(r_m,\varphi_m)}\ =0,$$

т. е. равенство нулю потенциала ψ на поверхности нейтронной звезды и на сепаратрисе, разделяющей открытые и замкнутые магнитные силовые линии, а также равенство нулю продольного электрического поля на верхней границе области ускорения $z=H_{gap}$.

Однако для нахождения самой функции H_{gap} необходимо хотя бы грубо рассмотреть процесс рождения частиц в магнитосфере, что невозможно без знания энергий первичных частиц. Таким образом, для определения H_{gap} необходимо в свою очередь знать ускоряющий потенциал ψ и $H_{gap}=H_{gap}[\psi]$ является функционалом от потенциала. В итоге, корректной постановкой задачи будет являться одновременное самосогласованное определение двух функций: $\psi(r_m,\varphi_m,z)$ и $H_{gap}(r_m,\varphi_m)$.

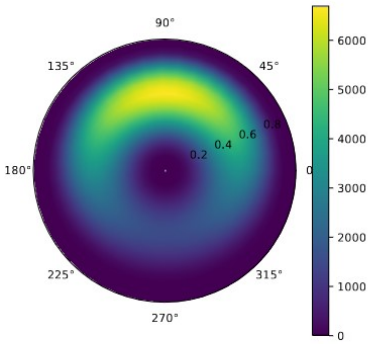
Данная задача решалась итеративным методом, заключающимся в последовательном решении уравнения Пуассона с помощью Physics Informed Neural Networks и последующим обновлением высоты зазора по формуле

$$H_{gap}(r_m,\varphi_m)=min\left(l_e+l_\gamma(l_e)\right)$$

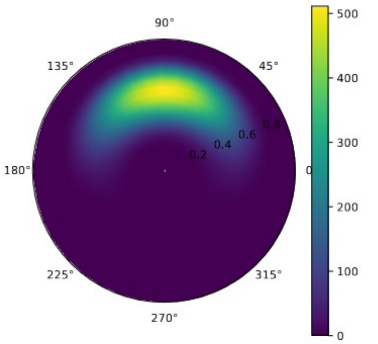
где l_e — длина свободного пробега электрона до испускания фотона, $l_\gamma(l_e)$ — длина свободного пробега испущенного фотона.

Для расчета множественности плазмы использовалась модель предложенная в работе[3], в которой, однако, учитывалось зависимость всех параметров от положения на полярной шапке.

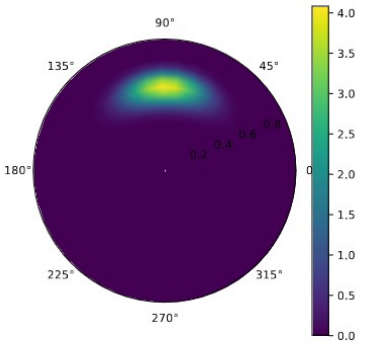
В итоге впервые удалось получить самосогласованно вычисленную плотность вторичной плазмы.



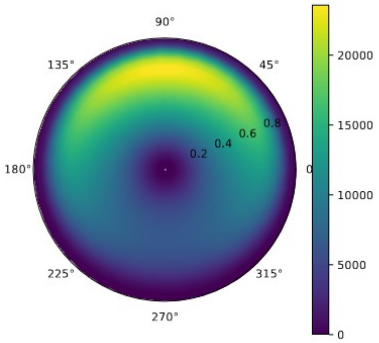
(a) $\chi = 85°$, $P = 0.3$ с, $B_{12} = 1.5$

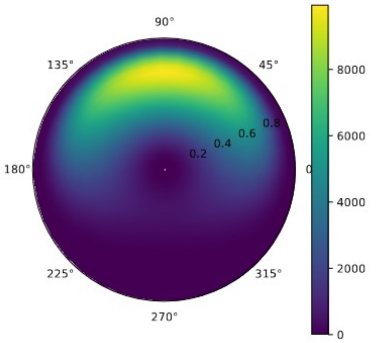


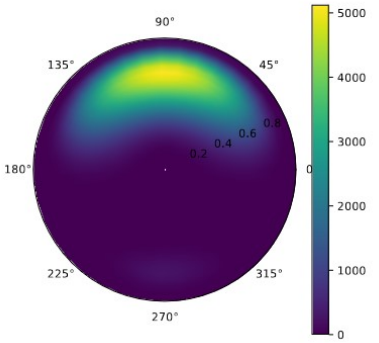
(b) $\chi = 88°$, $P = 0.3$ с, $B_{12} = 1.5$



(c) $\chi = 89.3°$, $P = 0.3$ с, $B_{12} = 1.5$







Литература

1. *Beskin V. S., Philippov A. A.* On the mean profiles of radio pulsars–I. Theory of propagation effects // Monthly Not. Roy. Astron. Soc. 2012. V. 425(2). P. 814–840.
2. *Ruderman M. A., Sutherland P. G.* Theory of pulsars — Polar caps, sparks, and coherent microwave radiation // Astrophys. J. 1975. V. 196. P. 51–72.
3. *Hibschman J. A., Arons J.* Pair Production Multiplicities in Rotation-powered Pulsars // Astrophys. J. 2001. V. 560(2). P. 871–884.

УДК 533.951.7

Спектр магнитогидродинамической турбулентности при наличии внешнего азимутального магнитного поля в приближении β-плоскости

***К. А. Дроздов*[1,2], *А. С. Петросян*[2]**

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

Цель данного исследования заключается в изучении спектров общей энергии [1] двумерной магнитогидродинамической турбулентности в плазме, вырождающейся при наличии внешнего азимутального магнитного поля $\boldsymbol{B}_0$ [2]. В частности, исследование проводится с учетом приближения β-плоскости [3] и использованием псевдоспектрального метода с диалиасиногом $3/2$. Азимутальное магнитное поле рассматривается как фактор, оказывающий влияние на спектры энергии и потоки в плазме, что важно для понимания турбулентных процессов в таких условиях.

$$\begin{cases} \nabla \boldsymbol{u} = 0, \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}) + 2\boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{u} = -\dfrac{\nabla p}{\rho} + \dfrac{1}{c\rho}\, \boldsymbol{j} \times (\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}_0) + \vartheta \Delta \boldsymbol{u}, \\ \nabla \boldsymbol{B} = 0, \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = \nabla \times (\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{B}) + \eta \Delta \boldsymbol{B}. \end{cases}$$

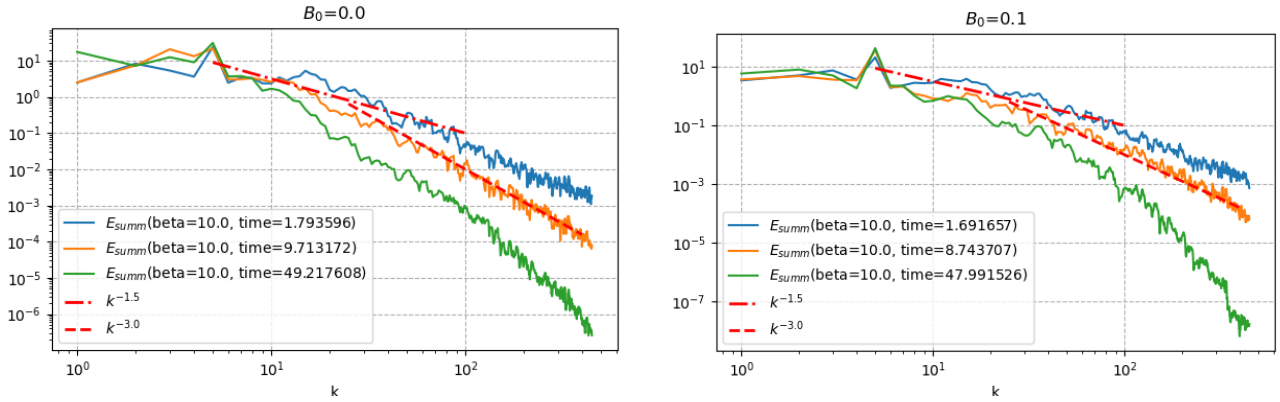


Рис. 1. Спектр суммарной энергии МГД турбулентности в β-плоскости, полученный в результате моделирования с параметрами: $N = 1024, \beta = 10, \vartheta = 10^{-5}, \eta = 10^{-5}, k_0 = 20, 1/4\pi\rho = 1, B_0 = 0; 0{,}1$

В результате проведенной работы было проиллюстрировано наличие спектра Ирошникова-Крейчнана для суммарной энергии магнитогидродинамической турбулентности и его затухание со временем в результате сильного влияния диссипативного слагаемого, связанного с магнитным полем, на завихренность.

Литература

1. *Зиняков Т. А., Петросян А. С.* Спектры двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111. № 1–2(1). С. 65–74.
2. *Tobias S. M., Diamond P. H., Hughes D. W.* β-Plane Magnetohydrodynamic Turbulence in the Solar Tachocline // Astrophys J. American Astronomical Society. 2007. V. 667(1). P. L113–L116.
3. *Зиняков Т. А., Петросян А. С.* Зональные течения в двумерной затухающей магнитогидродинамической турбулентности на β-плоскости // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 108. № 1–2. С. 75–82.

УДК 523.43-852

Фотохимическая модель ионосферы Марса

***Д. А. Кошкина*[1,2], *А. С. Петросян*[1,2]**

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

Ионосфера Марса представляет собой важный слой, в котором происходит потеря нейтральной составляющей нижней атмосферы, поэтому представляется важным разработать фотохимическую модель ионосферы Марса, совместимую с ионосферно-термосферным слоем атмосферы.

В работе разработана фотохимическая модель верхней атмосферы Марса с учетом процессов ионизации и фотодиссоциации. Основная часть реакций была взята из [1], поскольку рассмотренные там реакции имеют наибольший вклад на динамику атмосферы Марса. Константы скоростей реакций и сечения фотодиссоциации являются справочными данными. Наиболее важным параметром модели является коэффициент турбулентной диффузии, который описывает вертикальное турбулентное перемешивание и меридиональную циркуляцию. В предлагаемой модели рассматриваются два варианта коэффициента вертикальной диффузии ионосферы: традиционная модель и модель из [2], учитывающая влияние гравитационных волн на коэффициент турбулентной диффузии. Первая модель описывается следующей зависимостью коэффициента турбулентной диффузии от высоты:

$$K(z) = K_1 \exp\left(S_1(z - z_m) - S_2(z - z_m)^2\right), \quad (1)$$

где S_2=0, при $z \leq z_m$. Значения параметров взяты из [2]. Вторая же модель подробно описана в [3].

В качестве исходного использовано уравнение непрерывности для описания модели переноса различных составляющих атмосферы Марса, и, используя две модели для коэффициента диффузии, разработана разностная схема для описания химических процессов атмосферы на основе модернизированного метода Ньютона второго порядка. Сформулированы граничные условия и построены высотные профили температур и давлений компонент ионосферы. Также получены высотные профили нейтральной и ионной компонент атмосферы Марса, результаты представлены на рис. 1 и 2.

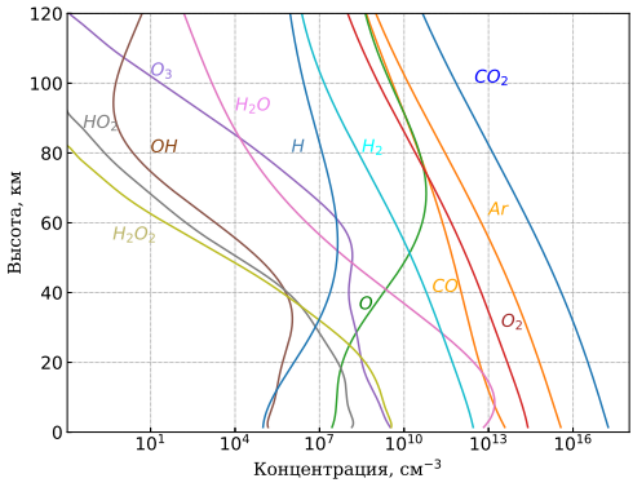


Рис. 1. Высотный профиль концентраций нейтральных компонент атмосферы марса

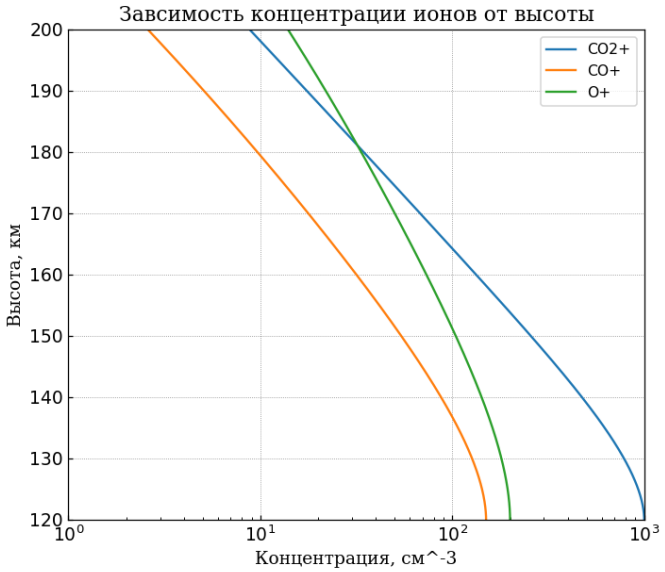


Рис. 2. Высотный профиль ионной компоненты атмосферы Марса

Проведено сравнение результатов расчетов с обеими моделями и получено, что вторая модель наиболее близка к результатам данных аппарата MAVEN. Разработанная модель имеет важное значение для понимания диссипации нейтральной атмосферы Марса.

Литература

1. *Красицкий О. П.* Диффузионно-фотохимическая модель атмосферы Марса: Препринт ИПМ № 75. М., 1995.
2. *Куликов Ю. Н.* Моделирование химического состава атмосферы Марса. Предварительные результаты сравнения высотного профиля атомарного кислорода с данными измерений спектрометра spicam // Труды Кольского научного центра РАН. 2018. № 5(9). Вып. 4. С. 202–216.
3. *Slipski M.* [et al.]. Variability of Martian turbopause altitudes // Journal of Geophysical Research: Planets. 2018. V.123. P. 2939–2957.

УДК 533.95

Наблюдения MMS интенсивных токовых структур и неидеальных электрических полей совместно с распространяющимися во внешнем плазменном слое ускоренными электронными пучками

***М. В. Леоненко*[1,2], *Е. Е. Григоренко*[1]**

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

Многоспутниковая миссия Magnetospheric Multiscale Mission (MMS) является самым современным инструментом для исследования земной магнитосферы. Пространственное разведение спутников MMS (~ 15 км) впервые позволило наблюдать процессы, происходящие в плазме на субионных и электронных кинетических масштабах. В пограничном плазменном слое (ППС) были обнаружены параллельные внешнему магнитному полю токовые слои (ТС) на ионных масштабах. Существенные вклад в генерацию таких токов вносили ускоренные продольные пучки ионов, движущиеся вблизи сепаратрисы магнитного пересоединения. Миссией MMS в ППС впервые были обнаружены короткоживущие продольные токовые слои на электронных кинетических масштабах [1]. В последующее время подобные структуры были обнаружены и внутри ПС, во внешних его областях, где силовые линии магнитного поля замкнуты.

В работе [2] впервые были обнаружены сверхтонкие токовые слои (СТС), вложенные в поперечный ТС хвоста, внутри ПС. Полутолщина таких слоев составляет порядка нескольких электронных гирорадиусов $\sim \rho_e$. Малая толщина СТС приводит к появлению значительной популяции размагниченных электронов. В современных работах демонстрируется, что это может приводить к усилению тока в слое и возбуждению неустойчивостей, в частности, быстрой электронной тиринг моды. Развитие подобных процессов приводит к генерации индукционных электрических полей. Продольные ускоренные электронные пучки также могут являться источником генерации электрических полей. Электростатические электрические поля были обнаружены, распространяющимися совместно с пучками частиц вблизи сепаратрис [3].

В русле быстрых плазменных потоков (БПП), распространяющихся из области пересоединения, плазма ПС является турбулентной. Это может приводить к генерации значительных неидеальных электрических полей. Неидеальным электрическим полем называют поле в системе координат, связанной с течением плазмы. Такое поле определяется, как $\boldsymbol{E'} = \boldsymbol{E} + [\boldsymbol{V}_e \times \boldsymbol{B}]$, где $\boldsymbol{E'}$ — неидеальное электрическое поле, $\boldsymbol{E}$ — измеряемое электрическое поле, $\boldsymbol{V}_e$ — потоковая скорость электронов, $\boldsymbol{B}$ — магнитное поле. Наличие неидеального электрического поля нарушает вмороженность плазмы, а также может создавать диссипацию энергии ($\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E'}$).

В данной работе, используя наблюдения MMS, мы покажем, что параллельные ускоренные электронные пучки, движущиеся из удаленного источника, ответственны за генерацию продольных СТС во внешней области ПС, т. е. на замкнутых силовых линиях. Совместно с пучками наблюдаются сильные электростатические неидеальные электрические поля. На рис. 1 представлен обзор двухминутного интервала наблюдений MMS в режиме burst mode. Спутники MMS находятся в ПС геомагнитного хвоста Земли с координатами $\sim [-24, 0.5, 4.7] R_E$. Данный интервал соответствует фазе роста суббури, с земной стороны от Х-линии в БПП магнитного пересоединения.

Спутники находятся во внешней области ПС на $B_x \sim -(10-20)$ нТ большую часть времени (рис. 1*а*). Наблюдаются множественные всплески потоковой скорости электронов, достигающие ~ 3000 км/с вдоль x-компоненты, которая примерно совпадает с направлением магнитного поля. Данные ускоренные электроны создают интенсивные токовые структуры, достигающие ~ 80 нА/м^2 (рис. 1*в*). Красными точками отсечены 20 событий, в которых плотность электрического тока превышает 30 нА/м^2. Наблюдается присутствие значительной (до 50%) электронной антипараллельной анизотропии (рис. 1*г*).

На рис. 1*д* представлены модули наблюдаемого электрического поля и полей конвекции электронов и ионов. Демонстрируется значительное нарушение вооруженности ионов во внешней области ПС ($B_x \sim -(10-20)$ нТ). Вмороженность электронов также нарушается локально. Наблюдаемые неидеальные электрические поля, приводящие к нарушению вмороженности приводят к присутствию диссипации энергии, характеризующейся параметром ($\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E'}$). Объемная мощность диссипации энергии достигает ~ -1000 пВт/м^3, что по порядку величины совпадает со значениями, обнаруженными в электронной диффузионной области [4]. Демонстрируется, что наблюдаемые флуктуации неидеального электрического поля являются электростатическими. Волны наблюдаются в частотном диапазоне ниже электронной гирочастоты $\omega_{c,e}$ (рис. 1*ж*).

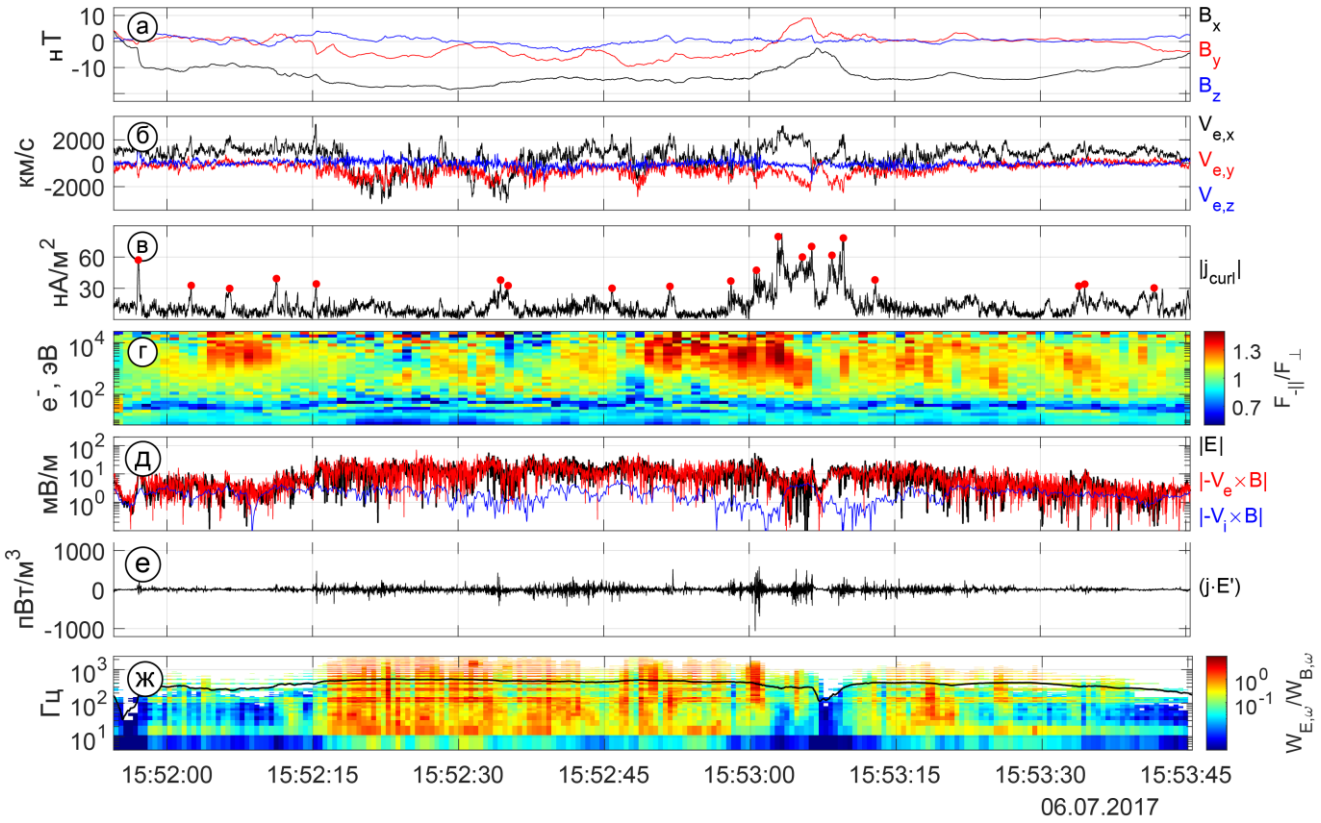


Рис. 1. Обзорный график наблюдений MMS 6 июля 2017 г. Сверху вниз: три компоненты: *а* — магнитного поля $\boldsymbol{B}$, *б* — электронной $\boldsymbol{V_e}$ потоковой скорости; *в* — плотность электрического тока $|\boldsymbol{j}_{curl}|$; *г* — энерго-временная спектрограмма отношения антипараллельного и перпендикулярного магнитному полю потоков электронов $F_{-||}/F_{\perp}$; *д* — модули электрического $|\boldsymbol{E}|$ поля и полей конвекции $|-\boldsymbol{V}_e \times \boldsymbol{B}|$ и $|-\boldsymbol{V}_i \times \boldsymbol{B}|$; *е* — величина параметра $(\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E}')$; *ж* — энерго-временная спектрограмма отношения спектральных энергий неидеального электрического и магнитного полей $W_{(E',\omega)}/W_{(B,\omega)}$. Данные приведены в GSE системе координат

В текущей работе также были исследованы электронные функции распределения, которые демонстрируют, что наблюдаемые потоки электронов создаются ускоренными продольными электронными пучками с энергией ~1–5 кэВ. Изученные явления могут давать значительный вклад в развитие турбулентности на электронных кинетических масштабах во внешней области ПС.

Работа авторов выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РНФ № 23-12-00031).

Литература

1. *Nakamura R.* [et al.] Transient, small-scale field-aligned currents in the plasma sheet boundary layer during storm time substorms // Geophysical Research Letters. 2016. V. 43(10). P. 4841-4849. doi.org/10.1002/2016GL068768.
2. *Leonenko M. V.* [et al.] MMS Observations of Super Thin Electron-Scale Current Sheets in the Earth's Magnetotail // Journal of Geophysical Research: Space Physics. 2021. V. 126(11): e2021JA029641. DOI: 10.1029/2021JA029641.
3. *Omura Y.* [et al.] Electrostatic solitary waves carried by diffused electron beams observed by the Geotail spacecraft // Journal of Geophysical Research: Space Physics. 1999. V. 104(A7). P. 14627-14637. DOI: 10.1029/1999JA900103.
4. *Li X.* [et al.] Three-dimensional network of filamentary currents and super-thermal electrons during magnetotail magnetic reconnection // Nature Communications. 2022. V. 13(1):3241. doi.org/10.1038/s41467-022-31025-9.

УДК 524.3-48, 524.7-333, 524.7-1/-8

Методика исследования физических свойств хозяйских галактик событий приливных разрушений звезд

М. В. Мочалина [1], ***С. Ю. Сазонов*** [1,2] , ***Г. А. Хорунжев*** [2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт космических исследований Российской академии наук (ИКИ РАН)

События приливного разрушения (СПР) звезд позволяют исследовать различные режимы аккреции на черные дыры и предоставляют в значительной степени уникальную информацию об относительно небольших (менее ста миллионов масс Солнца) сверхмассивных черных дырах (СМЧД), которые, как правило, находятся в неактивных ядрах галактик. Считается, что СМЧД существуют в ядрах большинства галактик, а их свойства связаны со свойствами их хозяйских галактик. В случае достаточно массивных галактик установлена тесная корреляция между массой центральной СМЧД и массой, светимостью и дисперсией звездных скоростей звездного балджа галактики [1, 2], что указывает на взаимосвязь роста СМЧД и эволюции галактик. Для менее массивных галактик и черных дыр эта связь менее изучена. Поэтому важно исследовать свойства хозяйских галактик СПР.

Основная задача данной работы состоит в том, чтобы разработать методику оценки физических параметров родительских галактик СПР на основе данных фотометрических наблюдений. Для оценки звездной массы родительских галактик мы используем алгоритмы, описанные в работах [3, 4]. За основу взят программный пакет Python Prospector [5], который представляет собой инструмент для подгонки реалистичных моделей распределения энергии в спектре галактик к данным наблюдений. Эти модели строятся с использованием программного пакета FSPS [6]. Имитационные наблюдения выполняются путем красного смещения распределения, а затем применяются полосы пропускания для каждого желаемого фильтра с помощью программного пакета sedpy [7]. Учитывая предоставленное пользователем наблюдения и связанные с ним неопределенности, Prospector вычисляет логарифмическую вероятность каждого вектора параметров галактики как логарифмическую вероятность наблюдения из имитационного наблюдения. Далее возможно оценить апостериорную вероятность на основе этого логарифмического правдоподобия и определяемых пользователем априорных значений путем выборки с помощью реализация на Python ансамбля Монте-Карло аффинно-инвариантной цепи Маркова [8].

Литература

1. *Gebhardt K. A.* [et al.]. Relationship between nuclear black hole mass and galaxy velocity dispersion // Astrophys. J. 2000. V. 539(1). P.13–16.
2. *Haering, N., Rix H.-W.* On the black hole mass-bulge mass relation // Astrophys. J. 2004. V. 604(2). P. 89–92.
3. *Mendel J.* [et al.]. A catalog of bulge, disk, and total stellar mass estimates for the sloan digital sky survey. Astrophys. J., Suppl. Ser. 2014. V. 210(1). P. 3-26.
4. *Velzen S.* [et al.]. Seventeen tidal disruption events from the first half of ztf survey observations: Entering a new era of population studies // Astrophys. J. 2021. V. 908(1). P. 4 –30.
5. *Johnson B. D.* [et al.]. Stellar population inference with prospector // Astrophys. J., Suppl. Ser. 2021. V. 254. P. 22–49.
6. *Conroy C.* [et al.]. The propagation of uncertainties in stellar population synthesis modeling I: The relevance of uncertain aspects of stellar evolution and the initial mass function to the derived physical properties of galaxies // Astrophys. J. 2009. V. 699(1). P. 486–506.
7. *S*edpy // GitHub : [Электронная платформа]. URL: https://github.com/bd-j/sedpy (дата обращения: 10.11.2023).
8. *Foreman-Mackey D.* [et al.]. emcee: The MCMC Hammer // Publ. Astron. Soc. Pac. 2013. V.125. P. 206–312.

УДК 53.072, 52-17

Малогабаритный спектрометр для университетского спутника

М. А. Сафронова, Е. И. Ольшевский

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В работе описан малогабаритный спектрометр для университетского спутника «Университетская легкая ядерная научная аппаратура» (УЛьЯНА). Спектрометр предлагается разместить на спутнике

формата Кубсат, который будет запущен на околоземную полярную орбиту. Эксперимент является продолжением исследований, которые проводились комплексом научной аппаратуры АРИНА на борту спутника Ресурс-ДК1 с орбитой на высоте 350–600 км и наклонением 70° [1].

Основными научными задачами эксперимента являются изучение всплесков высокоэнергичных заряженных частиц и оценка радиационной обстановки в околоземном космическом пространстве. Также прибор может являться прототипом планирующихся космофизических экспериментов, что позволит отработать методику их проведения.

На рис. 1 представлена схема спектрометра, высота которого составляет 400 мм, ширина 250 мм, длина 250 мм.

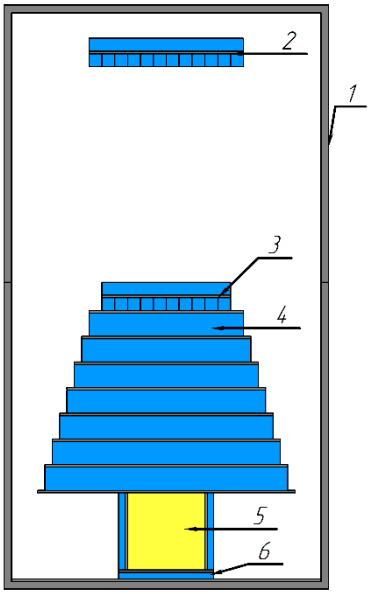


Рис. 1. Схема спектрометра УЛьЯНА. *1* — контейнер, *2* — верхние детекторы С1 и С2; *3* — нижний детектор С3 (С31, С32), *4* — поглощающие слои калориметра (С4–С10), *5* — кристалл CsI, *6* — детекторы системы антисовпадений

Спектрометр состоит из различных систем сцинтилляционных детекторов: телескоп из пластиковых детекторов С1, С2 и С3, сегментированных на полосы для измерения координат; семь следующих детекторов С4–С10 и кристалл CsI образуют калориметр; система антисовпадений. Конфигурация прибора позволяет не только регистрировать энергию частиц, но и определять направление их прилета.

Для определения характеристик прибора было проведено моделирование прохождения частиц через детекторы с помощью программного обеспечения Geant4 [2]. Моделировался изотропный поток электронов и протонов с энергией от 2 до 200 МэВ. С использованием методов машинного обучения проведена идентификация и разделение частиц, также были определены относительные значения светосилы для электронов и для протонов. Машинное обучение было реализовано с помощью библиотеки TMVA фреймворка ROOT CERN [3].

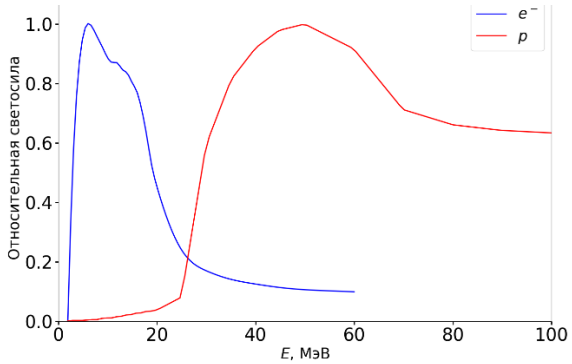


Рис. 2. Энергетические зависимости относительной светосилы

Энергетические зависимости относительной светосилы, полученные в результате отбора приведены на рис. 2. Видно, что энергетический диапазон работы спектрометра составляет 3–20 МэВ для

электронов и 30–150 МэВ для протонов. Эти значения соответствуют относительной светосиле выше уровня 0,5. Максимальное значение светосилы приходится на 6 МэВ и 50 МэВ для электронов и протонов соответственно.

Литература

1. *Бакалдин А. В.* [и др]. Спутниковый эксперимент «Арина» по изучению солнечно-магнитосферных и геофизических эффектов в потоках высокоэнергичных частиц в околоземном пространстве // Космические исследования. 2007. Т.45. №5. С. 471–474.
2. Официальный сайт набора библиотек для моделирования GEANT4 [Электронный ресурс]. URL: https://geant4.org/ (дата обращения: 25.12.2023).
3. Официальный сайт пакета программ и библиотек ROOT [Электронный ресурс]. URL: https://root.cern/ (дата обращения: 25.12.2023).

УДК 533.9

Холловская магнитная гидродинамика во вращающейся частично ионизованной плазме. Линейные волны

***Т. В. Галстян*[1,2], *Д. А. Климачков*[2], *А. С. Петросян*[1,2]**

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

Крупномасштабные процессы в частично ионизованной плазме играют определяющую роль в плазменной астрофизике и космической физике. Отметим, прежде всего, физические процессы в межзвездном газе, в астрофизических дисках и в ионосферах планет и Земли. Вращение частично ионизованной плазмы играет определяющую роль для описания крупномасштабных процессов. Полное описание частично ионизованной плазмы включает уравнения для электронной, ионной и нейтральной компонент. Такая система уравнений представляет собой неразрешимую задачу для аналитических и численных исследований. В работе развита теория, описывающая частично ионизованную плазму при наличии вращения всех компонент плазмы на основе холловской магнитной гидродинамики. Подход холловской магнитной гидродинамики для описания систем без вращения был сделан в [1], однако было показано, что добавление вращения сильно модифицирует уравнения полученные в [1]. Система уравнений холловской магнитной гидродинамики для вращающейся частично ионизованной плазмы имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \mathbf{v}) = 0 \tag{1}$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla P + \frac{\mathbf{J} \times \mathbf{B}}{c} - 2\rho(\mathbf{\Omega} \times \mathbf{v}) \tag{2}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = rot(\mathbf{v} \times \widetilde{\mathbf{B}} - \frac{4\pi\eta}{c}\mathbf{J} - \frac{4\pi\eta_H}{c}\mathbf{J} \times \hat{\widetilde{\mathbf{B}}} + \frac{4\pi\eta_A}{c}((\mathbf{J} \times \hat{\mathbf{B}}) \times \hat{\widetilde{\mathbf{B}}} +$$
$$+ \frac{\frac{\rho_n}{\rho\nu_{in}}}{1 + \frac{4\rho_n^2\Omega^2}{\rho^2\nu_{in}^2}}((\mathbf{J} \times \hat{\mathbf{B}}) \times 2\mathbf{\Omega} + \frac{\rho_n}{\rho\nu_{in}}2\mathbf{\Omega}(2\mathbf{\Omega}, \mathbf{J} \times \hat{\mathbf{B}}) - \frac{\rho_n}{\rho\nu_{in}}4\Omega^2(\mathbf{J} \times \hat{\mathbf{B}})) \times \hat{\widetilde{\mathbf{B}}})) \tag{3}$$

Для системы (1)-(3) получены дисперсионные уравнения в различных приближениях: быстрые вращения, медленные вращения, низкие частоты и высокие частоты. Анализ дисперсионных уравнений указывает на существенное влияние вращения на линейные моды. Получены волновые моды, которые вызваны только вращением:

$$\omega^2 = \frac{c_s^2k^2 + 4\Omega^2 \pm \sqrt{(c_s^2k^2 + 4\Omega^2)^2 - 16\Omega^2c_s^2k_z^2}}{2} \tag{4}$$

Также исследованы традиционные моды холловской магнитной гидродинамики, подверженные изменениям вследствие вращения. Например, для Альфвеновской волны получена следующая модификация:

$$\omega = \Omega + \frac{i\eta k^2}{2} \pm \sqrt{(\Omega - \frac{i\eta k^2}{2})^2 - k_z^2 v_A \widetilde{v_A}} \qquad (5)$$

В дальнейшем планируется развить разработанную теорию, рассмотрев приближение бета-плоскости, а также учитывая влияние гравитации и вязкости течений в плазме.

Литература

1. *Pandey B. P., Wardle M.* Hall magnetohydrodynamics of partially ionized plasmas // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2008. V. 385(4). P. 2269–2278.

УДК 524.82

Поглощение в линии 21 см в догалактическую эпоху

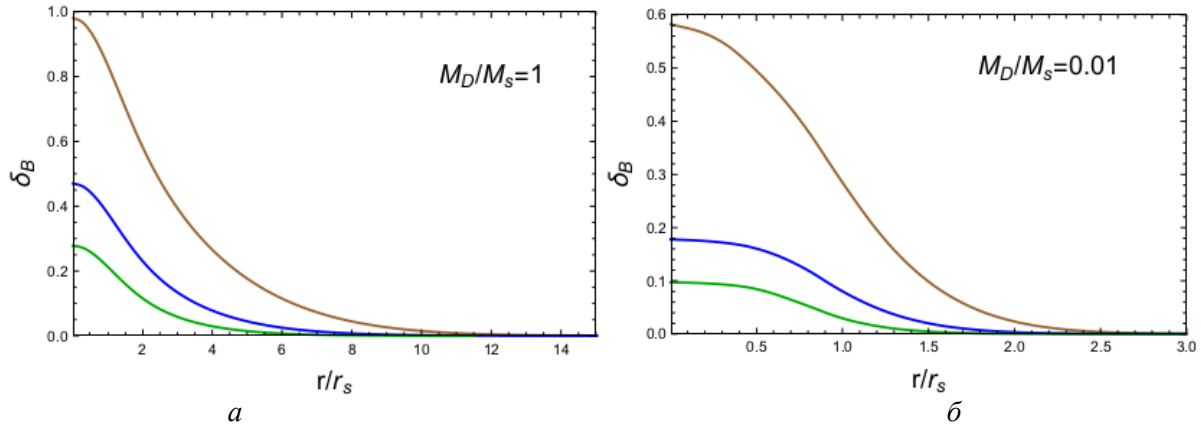
Ю. Н. Ерошенко

Институт ядерных исследований РАН

В данной работе исследовано поглощение на звуковых волнах, генерируемых эволюционирующими объектами из темной материи (ТМ) в масштабах масс, меньших массы Джинса.

Космологической эпохой темных веков называют интервал времени между рекомбинацией водорода и реионизацией Вселенной. Новый всплеск интереса к эпохе темных веков возник в связи с запуском космического телескопа им. Дж. Уэбба. Помимо наблюдения первых галактик, инструментом для изучения состояние газа в эпоху Темных веков служит поглощение в линии 21 см [1]. Линия 21 см соответствует переходам между уровнями сверхтонкого расщепления в атомах нейтрального водорода. Если в газе есть неоднородности, то с ними будут связаны пекулярные скорости движения газа и некоторое дополнительное поглощение [2-4]. Захват газа возможен в гало ТМ, которые имеют массу, большую массы Джинса (M_s~10^5 масс Солнца). Если масса гало меньше, то такой объект барионы не захватывает. Газ разбегается от них в виде звуковых волн, которые затухают и, как обычно считается, не представляют интереса. Целью данной работы является выяснение вопроса о том, какова величина поглощения в линии 21 см на таких волнах.

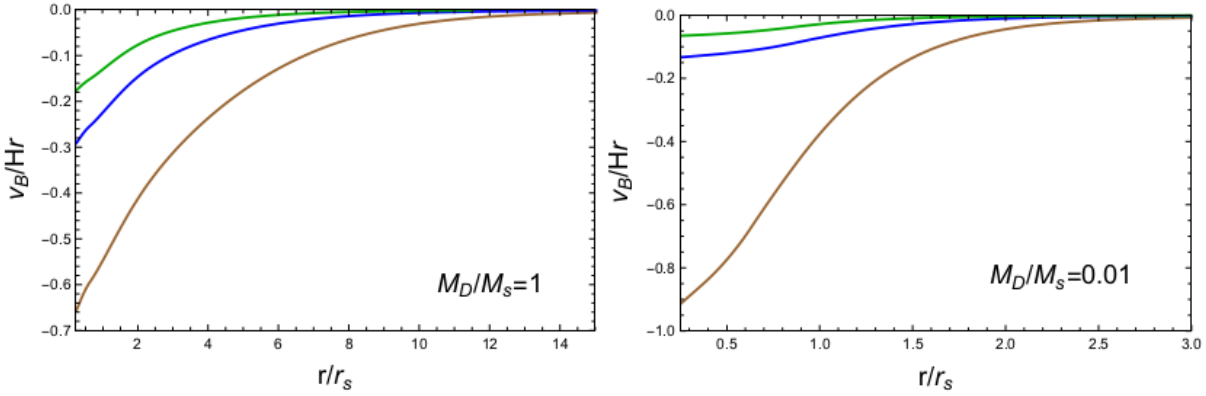
Рассматриваем сферически-симметричное возмущение плотности в ТМ. Избыток плотности ТМ создает гравитационное поле. Газ растекается от центра медленнее, чем по закону Хаббла, и такой избыток плотности мы называем звуковой волной. В работе [5] было получено линеаризованное уравнение для эволюции возмущений. Мы рассматриваем двухкомпонентную среду, состоящую из ТМ и барионного газа. Двухкомпонентная среда из ТМ и барионов рассматривалась в работе [6], но только в линейном приближении на красных смещениях z>150. Мы рассматриваем эпоху z<150, когда прекращается подогрев барионного газа реликтовым излучением. Источник гравитационного поля в нашем случае может быть и нелинейным. В результате решения полученных уравнений найден характер эволюции плотности (рис. 1) и поле скоростей в звуковой волне (рис. 2).



а *б*

Рис. 1. Возмущение плотности в звуковой волне в зависимости от красного смещения z=10, 15 и 20 (сверху вниз) для масс объекта из темной материи с массой M_s (*а*) и массой 0.01M_s (*б*)

Далее рассчитывается поглощение в линии 21 см на звуковых волнах с учетом распространенности объектов из ТМ во Вселенной в рассматриваемые ранние эпохи. Результат показан на рис. 3. для консервативного случая со спиновой температурой, приведенной в работе [1], и для наиболее оптимистического случая, когда спиновая температура равна кинетической температуре газа. Для $z>15$ эффект поглощения составляет десятые и сотые доли процента от величины поглощения в однородной Вселенной, а на $z<15$ величина поглощения составляет несколько процентов в оптимистическом случае и десятые доли процента в консервативном случае. Подробности расчетом приведены в [7].



а *б*

Рис. 2. Пекулярная скорость в звуковой волне в зависимости от красного смещения z=10, 15 и 20 (сверху вниз) для масс объекта из темной материи с массой M_s (*а*) и массой $0.01M_s$ (*б*)

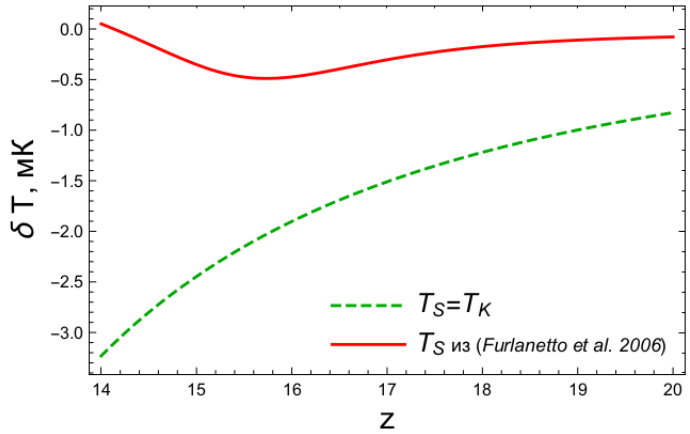


Рис. 3. Глубина поглощения в линии 21 см в зависимости от красного смещения. Сплошная кривая показывает поглощение для спиновой температуры, рассчитанной в работе [1]. Штрихованная кривая соответствует случаю, когда спиновая температура равна кинетической температуре газа

Литература

1. *Furlanetto S. R., Oh S. P., Briggs F. H.* Cosmology at low frequencies: The 21 cm transition and the high-redshift Universe // Phys. Rep. 2006. V. 433(4–6). P. 181–301.
2. *Дубрович В. К.* Молекулы космологического происхождения // Письма в АЖ. 1977. Т. 3. № 6. С. 243–245.
3. *Зельдович Я. Б.* О спектральных линиях дозвездного происхождения // Письма в АЖ. 1978. Т. 4. № 3. С. 165–166.
4. *Vasiliev E. O., Shchekinov Y. A.* Observational manifestations of the first protogalaxies in the 21 cm line // Astron. Rep. 2012. V. 56(2). P. 77–83.
5. *Bonnor W. B.* Jeans' formula for gravitational instability // MNRAS. 1957. V. 117(1). P. 104–117.
6. *Peebles P. J. E.* Dark matter and the origin of galaxies and globular star clusters // Astrophys. J. 1984. V. 277(2). P. 470–477.
7. *Eroshenko Yu. N.* Nonlinear generation of sound waves in the pre-galactic epoch and 21 cm absorption // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2312.05374.

УДК 524.338.5

Количественный анализ спектров звезд типа UX Ori. звезда UX Ori и CQ Tau

***П. Димитриева*[1], *В. П. Гринин*[2]**

[1]Санкт-Петербургский государственный университет
[2]Пулковская астрономическая обсерватория

Формирование звезд из межзвездной среды — физический процесс, который до сих пор не изучен до конца. Известно, что многие молодые звезды окружены околозвездными дисками, из которых позже могут формироваться планетные системы. Изучение таких звезд дает ключ к пониманию того, как образовалась наша Солнечная система, поэтому большой интерес представляют переменные звезды, у которых изменение блеска вызвано изменениями околозвездной экстинкции на луче зрения. Главная причина такой переменности — небольшой наклон околозвездных дисков к лучу зрения.

Молодым звездам, еще не пришедшим на Главную Последовательность, свойственна фотометрическая активность разных типов. Звезды типа UX Ori (UXOR) — молодые звезды, которые были отнесены в отдельный спектральный класс относительно недавно [2,3].

В работе исследуются звезды UX Ori и CQ Tau, которые являются представителями звезд типа UX Ori.

В работе были определены эквивалентные ширины проявившихся индивидуальных линий по спектрам звезд, полученных ранее [1]. По эквивалентной ширине эмиссионной линии Hα был рассчитан темп аккреции. Для звезды UX Ori средний темп аккреции составил $1.27\ 10^{-7}$ ($M_\odot$/год), для звезды CQ Tau — $1.06\ 10^{-7}$ ($M_\odot$/год). В результатах прослеживается нестабильность темпа аккреции, значения которого могут отличаться в 2 раза при одном и том же уровне блеска звезды. Полученные результаты подтверждают, что звезды UX Ori и CQ Tau являются представителями типа UX Ori и аккрецирующий материал является следствием взаимодействия материала протопланетного диска со звездой.

В дальнейшем планируется проделать этот же алгоритм для другой звезды типа UX Ori — RR Tau. На данный момент получены спектральные и фотометрические наблюдения более высокого разрешения этой звезды в минимуме и максимуме. Планируется изучить эту звезду в период минимума и максимума активности.

Литература

1. *Grinin V. P. et al.* Optical spectra of five UX Orionis-type stars // Astronomy & Astrophysics. 2001. V. 379(2). P. 482–495.
2. *Grinin V. P.* Young stars with non-periodic algol-type minima // Astronomical and Astrophysical Transactions. 1992. V. 3(1). P. 17-32.
3. *Grinin V.* UX Ori-type stars // Stars: From Collapse to Collapse. 2017. V. 510. P. 32.

Секция физики высоких плотностей энергии

Председатель: О. Ф. Петров (д. ф.-м. н., академик РАН, профессор)

Зам. председателя: К. Г. Косс (к. ф.-м. н.)

Секретарь: Д. В. Сазонова

Дата: 02.04.2024 Время: 10:00

УДК 536.331

Исследование фазовой диаграммы сверхтугоплавкой системы Ta-Zr-C

***А. С. Булава*[1,2], *А. М. Фролов*[2], *М. А. Шейндлин*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Сверхтугоплавкие керамики (UHTC) — класс материалов, имеющих температуры плавления существенно выше 3000К. Вещества данного класса являются перспективными как для аэрокосмической отрасли [1], так и в ядерной энергетике [2], что обусловлено, прежде всего, способностью выдерживать высокие тепловые нагрузки. Особый интерес в виду своих рекордных температур плавления могут представлять карбиды переходных металлов — циркония, гафния и тантала. Однако применение этих веществ невозможно из-за недостатка данных об их теплофизических свойствах, в частности, об их температуре плавления. Эти данные необходимы для моделирования поведения материала при высокоэнергетических воздействиях.

Для определения параметров плавления и оптических характеристик сверхтугоплавких веществ применяется комбинация лазерного нагрева и различных оптических методов диагностики [3].

Однако при быстром нагреве сложность собой представляет регистрация момента начала плавения сверхтугоплавкой системы, поскольку характерные особенности в виде изгибов термограммы отсутствуют. Поэтому требуется привлечение дополнительных оптических методов диагностики состояния поверхности образцов.

Для объективной диагностики перехода точки солидуса в данной работе предлагается использовать метод, отслеживающий образование подвижных областей на поверхности исследуемого образца. При помощи высокоскоростной видеосъемки создается график функции, характеризующий изменение монохроматического изображения от кадра к кадру. Алгоритм для обработки видеоряда состоит из следующих шагов.

1. На изображении вручную выбирается область поверхности, совпадающая с пятном визирования спектрометра. В последующих шагах рассматривается только часть изображения, попавшая в выбранную область.

2. Для каждого кадра, начиная со второго, вычисляется разность интенсивностей соответствующих пикселей данного кадра и предшествующего ему.

3. Для каждого кадра, начиная со второго, вычисляется среднеквадратичное значение разностей из шага 2. Назовем эту величину среднеквадратичной разностью.

Применение данных методов позволило с высокой точностью описать условия плавления системы смешанного карбида Ta_x-$Zr_{1-x}C$ при молярной доле TaC свыше 50%. Впервые была составлена фазовая диаграмма системы смешанного карбида Ta_x-$Zr_{1-x}C$ при содержании TaC свыше 50%. В результате последовательных экспериментов в образце образовывалась однофазная система с фиксированной температурой плавления. Результат эксперимента показал расхождение с предсказанными в [4] значениями фазовых переходов исследуемой системы. Отличия от предсказанных значений температуры плавления варьировались от 30К в случае измерения температуры солидуса, до 110К при измерении температуры ликвидуса.

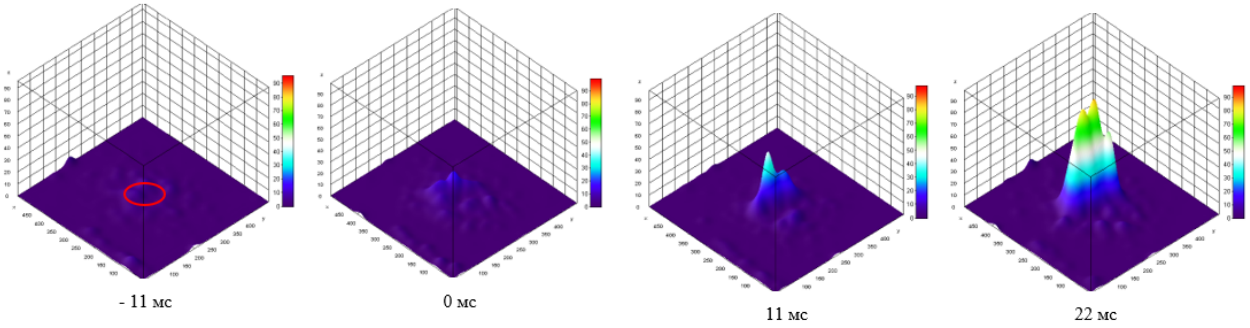


Рис. 1. Визуализация обработки видеоизображения в окрестности температуры солидуса. 0 мс — момент начала плавления. На кадре — 11 мс, предшествующему плавлению (солидусу), отмечена зона визирования пирометра и область анализа, соответствующая температурным измерениям

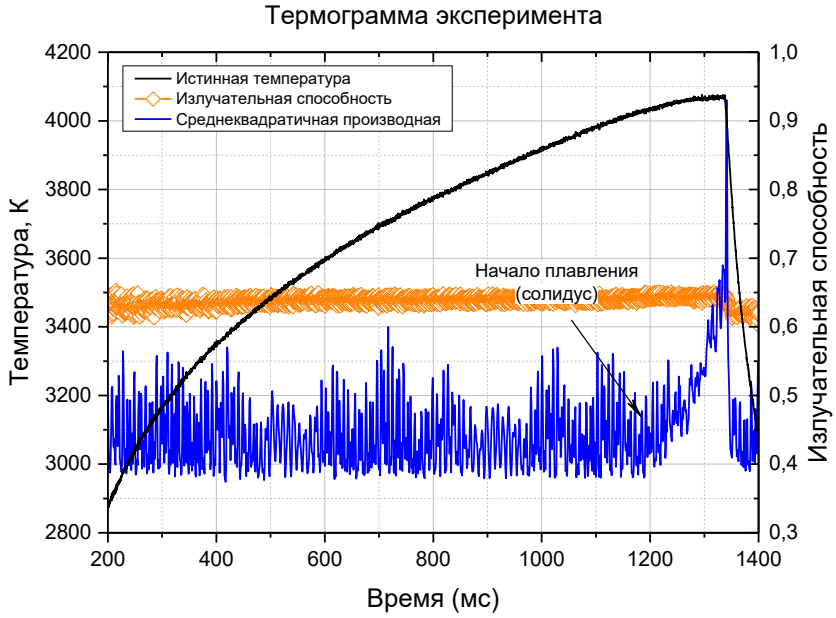


Рис. 2. Термограмма эксперимента по плавлению образца $Ta_{0.5}$-$Zr_{0.5}$-C с графиком среднеквадратичной разности

Литература

1. *Harrington T., Gild J.* [et al.]. Phase stability and mechanical properties of novel high entropy transition metal carbides // Acta Mater. 2019. V. 166. P. 271–280.
2. *Katoh Y., Vasudevamurthy G.* [et al.]. Properties of zirconium carbide for nuclear fuel applications // J. Nucl. Mater. 2013. V. 441(1). P. 718–742.
3. *Bgasheva T., Sheindlin M., Vervikishko P.* [et al.]. Laser-pulse melting of calcium oxide and some peculiarities of its high-temperature behavior // J. Am. Ceram. Soc. 2021. V. 104(7). P. 3461–3477.
4. *Гусев А. И.* Превращения беспорядок-порядок и фазовые равновесия в сильно нестехиометрических соединениях // УФН. 2000. Т. 170. № 1. С. 3–40.

УДК 533.9

Динамика коллоидных частиц в цепочечных структурах в разряде постоянного тока

***А. В. Ерилин*[1], *К. Г. Косс*[1,2], *Е. А. Кононов*[1,2], *М. М. Васильев*[2], *О. Ф. Петров*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Активными броуновскими называются частицы, которые могут преобразовывать энергию окружающей среды в энергию собственного направленного движения [1]. Движение активных частиц может быть как независимым, так и проявлять коллективный характер. Средняя кинетическая энергия активных

частиц может значительно превосходить среднюю кинетическую энергию (температуру) частиц окружающей среды, что свидетельствует о значительной неравновесности процесса. Примером активных частиц являются многие бактерии, подвижные клетки, микро- и нанороботы [1], пылевые частицы в разрядной плазме [2] и сверхтекучем гелии [3].

Представлены результаты экспериментального исследования динамики цепочечных структур в тлеющем разряде постоянного тока при воздействии лазерного излучения. Структуры формировались из активных броуновских частиц. Использовались сферические монодисперсные частицы меламин-формальдегида (МФ), покрытые медью. Поглощение лазерного излучения металлической поверхностью частиц приводило к нагреву их поверхности и возникновению термофоретической силы. В результате этого наблюдалось увеличение интенсивности движения микрочастиц.

Для регистрации частиц использовались две высокоскоростные видеокамеры, поставленные под углом девяносто градусов друг относительно друга. В результате обработки экспериментальных видеоданных для каждой частицы в структурах были получены: траектории и их фрактальные размерности, зависимости динамической энтропии первого пересечения [4] от параметра огрубления, средняя кинетическая энергия частиц. Данные параметры были вычислены как для трехмерного движения, так и для проекции движения на каждую из камер.

На протяжении всего эксперимента наблюдалось изменение полученной структуры: частицы могли менять свое положение и даже покидать ловушку стратифицированного разряда постоянного тока.

Экспериментально показано, что воздействие лазерного излучения на квазиодномерные (цепочечные) структуры влияет на структуры из активных броуновских частиц. С увеличением интенсивности лазерного излучения изменялись динамическая энтропия и фрактальная размерность траекторий частиц.

Литература

1. *Bechinger C.* [et al]. Active particles in complex and crowded environments // Rev. Mod. Phys. 2016. V. 88: 045006. DOI: 10.1103/RevModPhys.88.045006.
2. *Arkar K.* [et al]. Dynamics of Active Brownian Particles in Plasma // Molecules. 2021. V. 26(3): 561. DOI: 10.3390/molecules26030561.
3. *Petrov O. F., Boltnev R. E., Vasiliev M. M.* Experimental evolution of active Brownian grains driven by quantum effects in superfluid helium // Sci Rep. 2022. V. 12(1): 6085. DOI: 10.1038/s41598-022-09523-z.
4. *Allegrini P., Douglas J. F., Glotzer S. C.* Dynamic entropy as a measure of caging and persistent particle motion in supercooled liquids // Physical Review E. 1999. V. 60: 5714. DOI: 10.1103/PhysRevE.60.5714.

УДК 533.69.01

Противофазное подавление неустойчивости поперечного течения с помощью многоканального плазменного актуатора

***А. А. Абдуллаев*[1,2], *А. Я. Котвицкий*[1], *И. А. Моралев*[1], *М. В. Устинов*[3]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Центральный аэрогидродинамический институт

В аэродинамике летательных аппаратов одной из важнейших инженерных задач является управление ламинарно-турбулентным переходом. Практическая значимость решения этой задачи состоит в затягивании перехода, что приведет к снижению турбулентного трения и уменьшению расхода топлива летательных аппаратов. На стреловидном крыле в трехмерном пограничном слое возникает неустойчивость поперечного течения [1–3]. Данная неустойчивость проявляется в виде стационарных и бегущих вихрей. Стационарные возникают при обтекании потоком шероховатости на поверхности крыла, а бегущие порождаются турбулентностью набегающего потока. Именно нарастание амплитуды вихрей неустойчивости поперечного течения приводит к возникновению вторичной неустойчивости и переходу к турбулентности на стреловидном крыле. В условиях крейсерского режима полета переход вызывается нарастанием амплитуды стационарной моды неустойчивости.

Одним из перспективных методов управления переходом является метод противофазного подавления возмущений [3]. При этом искусственные возмущения могут возбуждаться различными способами. В данной работе исследовалась структура вихревых пакетов, вносимых в пограничный слой плазменным актуатором на основе диэлектрического барьерного разряда.

Эксперимент проводился на стреловидной модели с углом стреловидности 40° в условиях модельного течения при скорости набегающего потока в 25 м/с. Для создания трехмерного пограничного слоя на плоскую пластину наводился градиент давления с помощью тела вытеснения. Течение исследовалось панорамным методом цифровой трассерной визуализации частиц (PIV). Схема установки приведена на рис. 1.

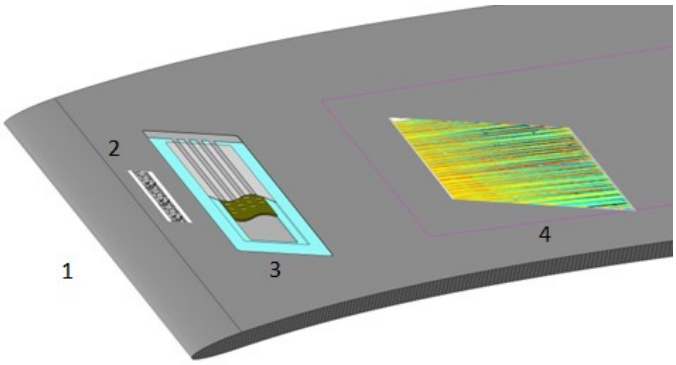


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: *1* — передняя кромка стреловидной модели; *2* — распределенная случайная шероховатость; *3* — многоканальный плазменный актуатор; *4* — область исследования пограничного слоя методом цифровой трассерной визуализации частиц

Многоканальный (16 каналов) актуатор на основе поверхностного барьерного разряда располагался на расстоянии 210 мм от передней кромки. Актуатор состоял из 16 электродов, сгруппированных в 4 линии. Расстояние и положение электродов подобрано так, чтобы обеспечить разрешение актуатора порядка ¼ длины волны наиболее нарастающей моды неустойчивости (1.4 мм). Структура пакета возмущений, порождаемой в пограничном слое объемной ЭГД силой, изучалась при амплитуде питающего напряжения до 5 кВ и частоте 50–100 кГц. На рис. 2 показано сопоставление структуры пакета от одиночной секции актуатора и от искусственной механической неровности, высотой 0.4 мм, расположенной на расстоянии 70 мм от передней кромки. Кроме того, структура пакета была сопоставлена с теоретическим предсказанием развития возмущений от эквивалентной объемной силы в пограничном слое, моделирующей разряд. Показано удовлетворительное согласие моделирования и эксперимента в пределах справедливости линейного приближения- до амплитуды возмущения порядка 10% локальной скорости потока.

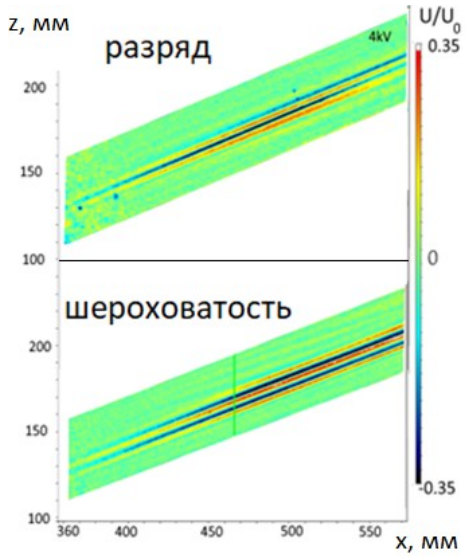


Рис. 2. Сопоставление структуры пакетов от одиночной секции актуатора при различном питающем напряжении и от искусственной механической шероховатости высотой 0.4 мм

Подавление естественных возмущений производилось в режиме обратной связи. На поверхность пластины наклеивалась распределенная случайная шероховатость высотой 20–40 мкм. При подавлении пакета вихрей, созданных этой шероховатостью, актуатор работал в режиме обратной связи. Для оптимизации вектора амплитуд управляющих напряжений использовался алгоритм градиентного спуска, в качестве целевой функции в процессе оптимизации использовалась квадратичная норма трансверсального профиля скорости в пограничном слое, ограниченном областью управления. Реализовано подавление неустойчивости поперечного течения, инициированной распределенной случайной шероховатостью, с помощью много-

канального плазменного актуатора. На рис. 3 показаны профили скорости поперек пограничного слоя, полученные за шероховатостью без управления и с включенным актуатором, работающим при оптимальном распределении напряжений по электродам. Можно видеть, что амплитуда вихрей снижается примерно в 5 раз в области управления. Такое управление приводит к изменению паттерна перехода, однако затягивание перехода к турбулентности требует либо более широкой по размаху области управления, либо использования искусственных модельных возмущений от отдельных локальных неровностей.

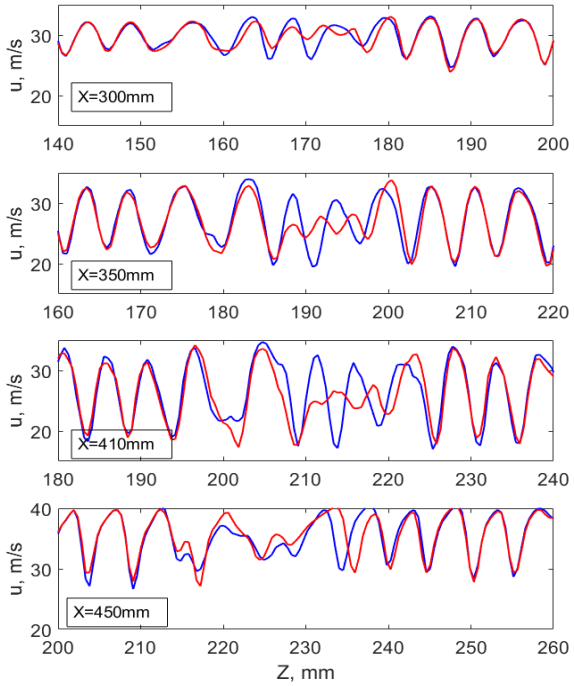


Рис. 3. Поперечные профили скорости при различном удалении от передней кромки, возмущения инициированы распределенной шероховатостью. Синяя кривая — разряд выключен, красная — включен многоканальный плазменный актуатор

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда №20-79-10372.

Литература

1. *Reed H. L., Kerschen E. J.* Boundary-layer receptivity to freestream disturbances // Annu. Rev. Fluid Mech. 2002. V.34. P. 291–319.
2. *Saric W. S., Reed H. L., White E. B.* Stability and transition of three-dimensional boundary layers // Annu. Rev. Fluid Mech. 2003. V. 25. P. 413–440.
3. *Устинов М. В.* Ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое // Ученые записки ЦАГИ 2013. Т. 44. С. 3–43.

УДК 536.41, 536.42

Методика обработки экспериментальных данных по тепловому расширению при импульсном нагреве

***А. Ч. Гаврильев*[1,2], *В. Н. Сенченко*[1], *С. А. Мельников*[1]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе рассматривается методика измерения теплового расширения веществ в микросекундном эксперименте. Выполнена оценка погрешности измерения теплового расширения тугоплавких металлов при высоких температурах. Для изучения теплофизических свойств вещества был экспериментально реализован метод джоулевого нагрева электропроводящих материалов в микросекундном диапазоне. Образец нагревается с помощью импульса тока высокой плотности, длительностью несколько десятков микросекунд, и за время длительности эксперимента измеряются такие параметры как ток через

образец, разность потенциалов на концах образца, яркостная температура материала. Методика по моделированию нагрева веществ описана в [1–3]. Кроме этого, с помощью высокоскоростной камеры, производится теневая фотосъемка для непосредственного измерения теплового расширения вещества. Схема системы измерения расширения образца показана на рис. 1.

Теневая фотосъемка производилась высокоскоростной видеокамерой при разрешении 1280x2 со скоростью 250 000 кадров в секунду. Время между кадрами 4 микросекунды. Результат теневой фотосъемки в виде склейки 20 последовательных кадров показаны на рис. 2.

Для обработки результатов теневой фотосъемки на языке программирования Python была написана программа для распознавания границ. Принцип действия алгоритма программы показан на рис. 3. Для каждого кадра теневого изображения бралось распределение интенсивности по горизонтальной оси X и сглаживалось фильтром Гаусса. Сглаженное изображение образца использовалось для определения диаметра образца по ширине на полувысоте [4].

Далее для моментов времени, соответствующих каждому кадру, рассчитывалось относительное расширение образца. Полученные результаты для эксперимента с гафнием (Hf) продемонстрированы на рис. 4.

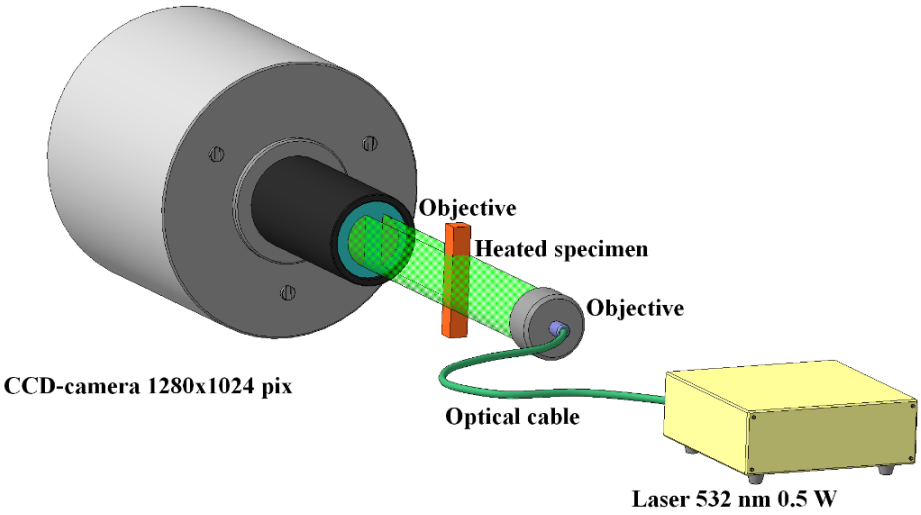


Рис. 1. Схема теневой фотосъемки



Рис. 2. Результат теневой фотосъемки (20 кадров, 80 мкс)

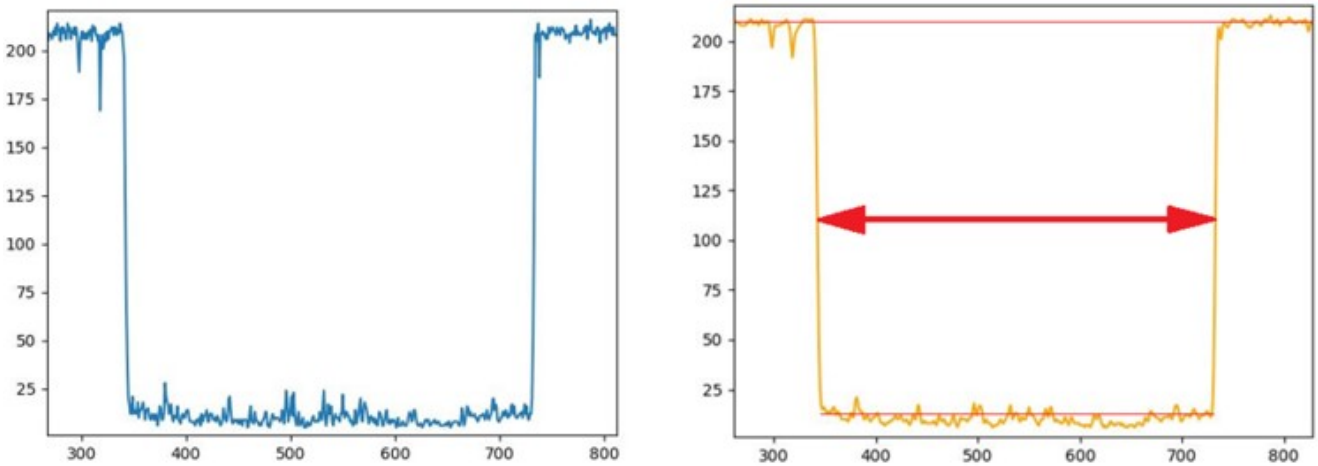


Рис. 3. Методика измерения ширины образца

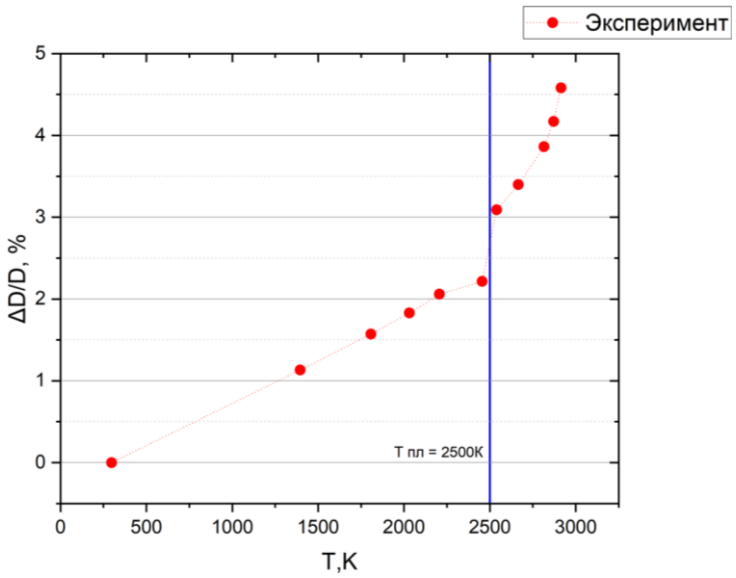


Рис. 4. Зависимость относительного расширения от температуры

Литература

1. *Гаврильев А. Ч., Сенченко В. Н., Мельников С. А.* Математическое моделирование эксперимента с быстрым электрическим нагревом образца // Труды 65-й Всероссийской научной конференции МФТИ в честь 115-летия Л. Д. Ландау. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: Физматкнига, 2023. С. 334–336.
2. *Гаврильев А. Ч., Сенченко В. Н., Мельников С. А.* Математическое моделирование эксперимента по изучению термического расширения металлов в твердой и жидкой фазе при медленном электрическом взрыве // Сборник тезисов I-й Всероссийской школы Национального центра физики и математики и института экспериментальной газодинамики и физики взрыва ФГУП «РФЯЦ_ВНИИЭФ» по газодинамики и физике взрыва для студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов, 14–16 марта 2023 г., г. Саров. С. 18–19.
3. *Гаврильев А. Ч., Сенченко В. Н., Мельников С. А.* Mathematical modeling of the fast pulse-heating experiment as applied to ruthenium // XXXVIII Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (ELBRUS 2023). URL: https://www.ihed.ras.ru/elbrus23/program/restore.php?id=262 (дата обращения: 15.05.2024).
4. *Гаврильев А.Ч., Сенченко В.Н., Мельников С.А.* Study of thermal expansion of substances by microsecond pulse electric heating method // XXXIX Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (ELBRUS 2023). URL: https://www.ihed.ras.ru/elbrus24/program/restore.php?id=102 (дата обращения: 15.05.2024).

УДК 533.9.15

Распределение электрического потенциала в аксиально несимметричном отражательном разряде

***А. П. Ойлер*[1,2], *А. В. Гавриков*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Отражательный разряд (или разряд Пеннинга) является разрядом, в котором реализована конфигурация скрещенных электрического и магнитного полей. Эта особенность используется, например, для создания источников плазмы [1] или для плазменного разделения смеси по массе [2]. Последнее применение является актуальным на сегодняшний день, поскольку при помощи плазменной методики можно осуществить высокопроизводительную сепарацию отработавшего ядерного топлива [2]. Но при разделении пучков ионов в аксиально симметричной конфигурации траектории сепарируемых частиц лежат только в меньшей части вакуумной камеры и больше половины объема плазменного столба фактически не используется. Если же минимум пространственного распределения потенциала сместить в сторону от инжектора разделяемых частиц, то эффективный радиус активно используемой области увеличится и может повыситься коэффициент сепарации.

В настоящее время одним из самых эффективных способов изменять распределение электрического потенциала в отражательном разряде является введение в разряд электронного пучка и вариация потенциала катодов [3]. Поэтому для экспериментальной реализации отражательного разряда с потенциальной ямой, расположенной не на оси симметрии вакуумной камеры, можно установить термоэмиссионный катод, который будет вводить электронный пучок.

В данной работе исследовалось, как изменяется пространственное распределение электрического потенциала при помощи электронного пучка, вводящегося в разряд на расстоянии 14 см от оси симметрии вакуумной камеры (рис. 1).

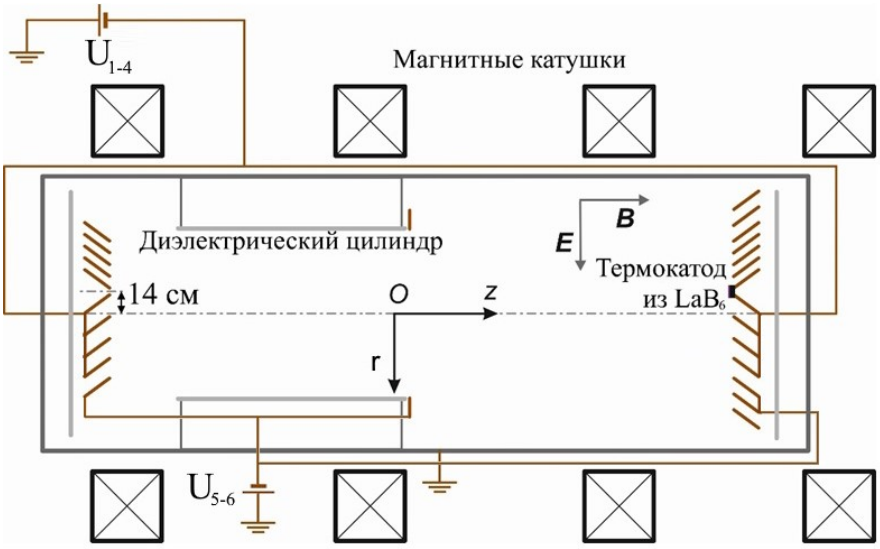


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки

Напряжение, поданное на первые электроды суммарным радиусом 20 см, составило $U_{1-4} = -600$ В, на остальные электроды, расположенные в кольцевой области радиусом от 20 см до 30 см, подавалось напряжение $U_{5-6} = -300$ В. Характерный ток разряда составил I=11 А. Давление буферного газа аргона составило $p = 0.3$ мТорр, аксиальное магнитное поле $B = 1400$ Гс.

Характерное распределение потенциала плазмы представлено на рис. 2. Оказалось, что глубина потенциальной ямы по порядку величины осталась такая же, что и в симметричном отражательном разряде при аналогичных условиях [2]. Было определено, что профиль потенциала в области с меньшим эффективным радиусом является квазилинейным с соответствующим электрическим полем $E = 20$ В/см. В области большего эффективного радиуса реализовался квазипараболический профиль потенциала.

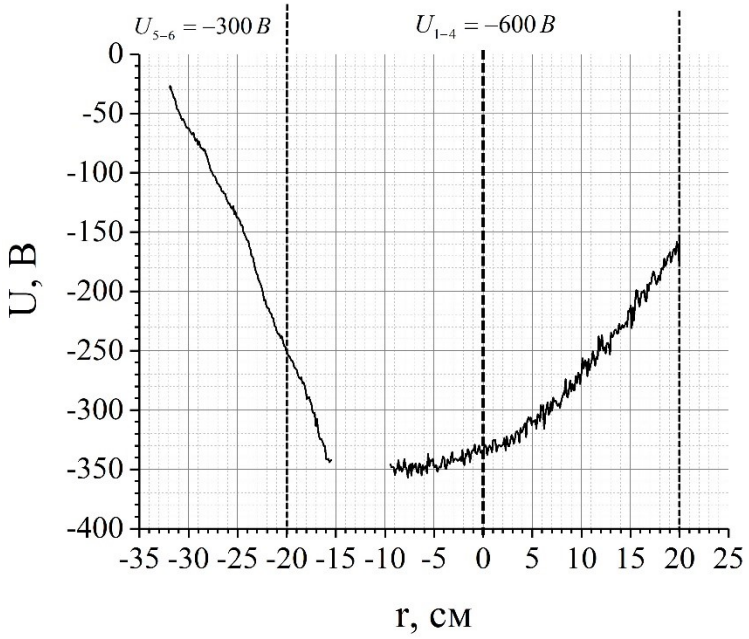


Рис. 2. Зависимость потенциала плазмы от радиального расстояния от оси симметрии вакуумной камеры

Литература

1. *Mamedov N. V.* [et al.] Discharge characteristics of the Penning plasma source // Technical Physics. 2018. V. 63. P. 1129–1136.
2. *Liziakin G.* [et al.] Plasma mass separation in configuration with potential well // Journal of Physics D: Applied Physics. 2021. V. 54(41): 414005.
3. *Trotabas B., Gueroult R.* Trade-off in perpendicular electric field control using negatively biased emissive end-electrodes // Plasma Sources Science and Technology. 2022. V. 31(2): 025001.

УДК 533.922

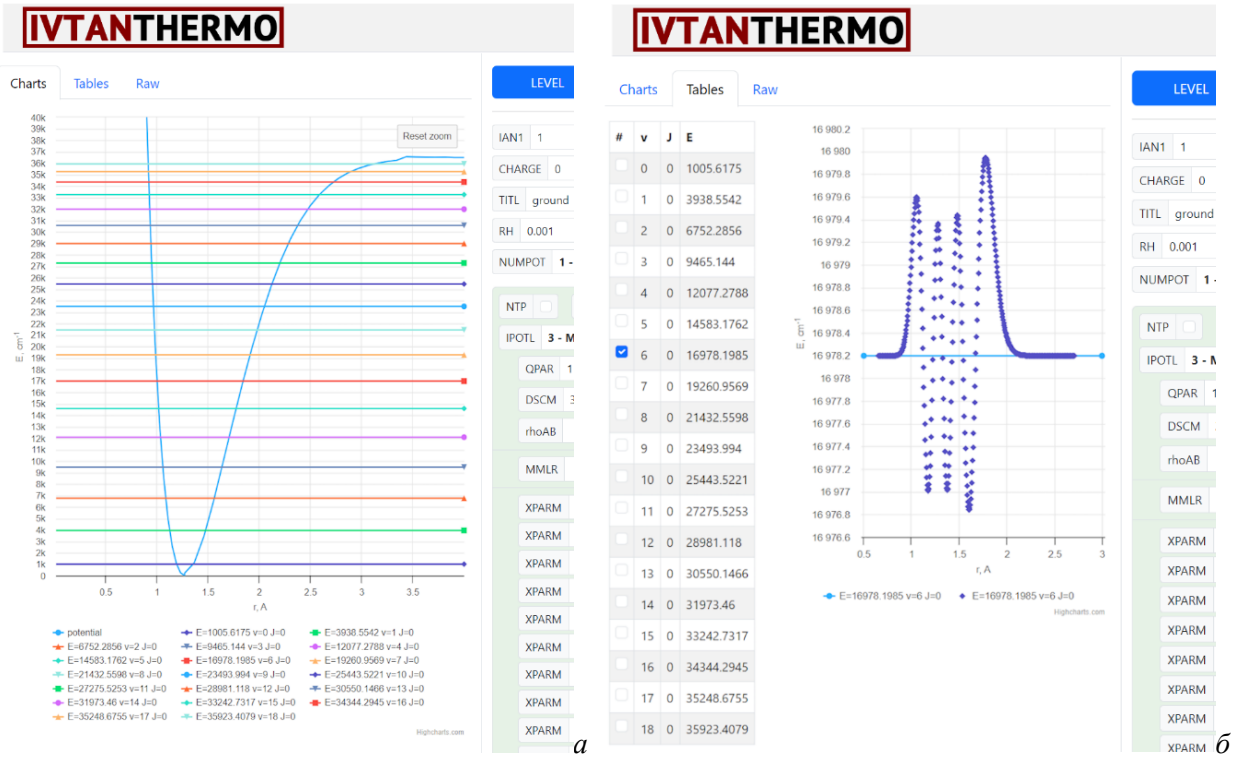
Веб-приложение для расчета колебательно-вращательного спектра по кривым потенциальной энергии

***А. В. Кравченко*[1,2], *М. А. Мальцев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Равновесное термодинамическое моделирование является инструментальным методом исследования состава низкотемпературной плазмы. Для реализации этого метода необходимо всестороннее понимание термодинамических функций всех молекулярных структур и ионов, составляющих исследуемую систему. Важным шагом в расчете этих термодинамических функций является определение колебательно-вращательного спектра молекул.

Расчеты колебательно-вращательного спектра аргидов ранее проводились в работах [1–5]. Они продемонстрировали, что для более точных расчетов необходимо учитывать квазисвязанные уровни энергии и определять спектр не тривиальных потенциалов межатомного взаимодействия. Для выполнения этих вычислений необходимо создать программный комплекс с интуитивно понятным пользовательским интерфейсом.



а *б*

Рис. 1. Пример веб-интерфейса для ввода данных и отображения результатов на графиках с уровнями энергий (*а*) и волновой функцией конкретного уровня (*б*)

В данной работе представлен новый алгоритм, предназначенный для выполнения всего процесса определения колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы, начиная с ввода данных в удобном для пользователя формате с одновременной верификацией полученных значений, заканчивая отображением и представлением результатов. На рис. 1 представлена часть интерфейса разработанного

приложения. Предполагается, что разработанное веб-приложение, созданное с помощью фреймворков Django [6] и Vue.js [7], будет включено в существующий пакет программного обеспечения GasThermo.

Литература

1. *Мальцев М. А., Осина Е. Л., Морозов И. В.* Термодинамические свойства димеров аргона $Ar2^+$ и Ar2 // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 1. С. 42–46.
2. *Мальцев М. А., Осина Е. Л., Морозов И. В.* Термодинамические свойства ArH+ и ArH // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 3. С. 367–370.
3. *Maltsev M. A., Morozov I. V., Osina E. L.* Thermodynamic Functions of ArO and ArO^+ // High Temp. 2020. V. 58. P. 184–189.
4. *Maltsev M. A., Kulikov A. N., Morozov I. V.* Thermodynamic properties of vanadium and cobalt argide ions, VAr^+ and $CoAr^+$ // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 774:012023. DOI: 10.1088/1742-6596/774/1/012023.
5. *Maltsev M. A.* [et al.]. Ab initio calculations of the interaction potentials and thermodynamic functions for ArN and ArN^+ // J. Comput. Chem. 2023. V. 44(12):1189. DOI: 10.1002/jcc.27078.
6. Django (web framework). Официальный сайт веб фреймворка Django [Электронный ресурс]. URL: https://www.djangoproject.com/ (дата обращения: 29.02.2024).
7. Vue.js (JavaScript-фреймворк). Официальный сайт JavaScript-фреймворка Vue.js [Электронный ресурс]. URL: https://vuejs.org/ (дата обращения: 29.02.2024).

УДК 538.9, 536.71

Исследование транспортных свойств металлов в твердой и жидкой фазах на основе первопринципных расчетов

***И. С. Гальцов*[1,2], *В. Б. Фокин*[2], *Д. В. Минаков*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Изучение транспортных свойств металлов имеет большое значение для прикладных нужд энергетики и физики экстремальных состояний вещества и для фундаментальных проблем физики твердого тела, таких как описание электрон-фононного взаимодействия. Среди теоретических подходов к рассмотрению транспортных свойств проводников можно выделить два основных направления: методы, основанные на решении кинетического уравнения Больцмана [1], и методы, берущие свое начало из теории линейного отклика [2]. В данной работе будут рассмотрены оба подхода.

В первой части будут представлены результаты расчетов транспортных свойств нескольких металлов (Al, Au, Pb, Fe, Ni) в твердой фазе, основанные на решении линеаризованного кинетического уравнения Больцмана методом Аллена [3]. Автором лично написан программный модуль для расчета удельного сопротивления и электронной теплопроводности в твердой фазе на основе результатов первопринципного моделирования методом функционала электронной плотности (DFT) [4]. Программный модуль интегрирован с кодом EPW [5] и использует полученные в первопринципном расчете матричные элементы электрон-фононного взаимодействия в представлении Ванье на грубых сетках **k**- и **q**-точек. Далее в ходе основной части расчета производится Ванье-интерполяция [6] на густые сетки, что существенно улучшает качество итоговых результатов.

Для получения данных об удельном сопротивлении никеля и железа в окрестности плавления и в жидкой фазе во второй части работы были выполнены расчеты по формуле Кубо-Гринвуда из теории линейного отклика с применением программных пакетов VASP [7] и GreeKuP [8]. Отдельное внимание уделено необходимости учета спиновой поляризации для более корректного описания свойств этих ферромагнитных материалов. Продемонстрировано, что учет спиновой поляризации позволяет заметно лучше описать указанные свойства, что подтверждено соответствующим сравнением с рядом экспериментальных работ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398).

Литература

1. *Sólyom J.* Fundamentals of the Physics of Solids: Vol. II: Electronic Properties. — Berlin: Springer, 2008.
2. *Sólyom J.* Fundamentals of the Physics of Solids: Vol. 3 — Normal, Broken-Symmetry, and Correlated Systems. — Berlin: Springer, 2010.

3. *Allen P. B.* New method for solving Boltzmann's equation for electrons in metals // Phys. Rev. B. 1978. V. 17(10). P. 3725–3734.
4. *Hafner J.* Ab-initio simulations of materials using VASP: Density-functional theory and beyond // J. Comput. Chem. 2008. V. 29(13). P. 2044–2078.
5. *Poncé S.* [et al.]. EPW: Electron–phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions // Comput. Phys. Commun. 2016. V. 209. P. 116–133.
6. *Giustino F.* Electron-phonon interactions from first principles // Rev. Mod. Phys. 2017. V. 89(1): 015003.
7. *Kresse G., Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54(16). P. 11169–11186.
8. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Thermodynamic, transport, and optical properties of dense silver plasma calculated using the GreeKuP code // Contrib. Plasma Phys. 2019. V. 59(3). P. 345–353.

УДК 537.523.5, 519.635.6

Моделирование распределения температурного поля в графитовом тигле при воздействии дугового разряда постоянного тока

Г. А. Блейхер, А. Я. Пак, Д. Е. Стовпец

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Ввиду динамичного развития многих отраслей промышленности и технологий увеличивается спрос на материалы, обладающие уникальными физическими и химическими свойствами. Среди таких материалов можно выделить карбиды и бориды металлов. Данные соединения отмечаются высокими тепло- и электропроводностью, стойкостью к коррозии, высокой прочностью, в некоторых случаях радиационной стойкостью. Такой обширный диапазон свойств определяет применение карбидов и боридов в различных отраслях науки и технологий таких, как электроника и электротехника, аэрокосмическая промышленность, высокоточная оптика и ядерная отрасль.

Существует несколько наиболее распространенных методов синтеза подобных соединений: карбо- и боротермическое восстановление, осаждение из парогазовой фазы и синтез в низкотемпературной плазме в условиях вакуума. Главными недостатками перечисленных методов являются необходимость использования инертной среды или создания условий вакуума, что требует большего количества средств и усилий, а также длительность реализации синтеза.

В данной работе будет проведено моделирование распространения теплового поля в процессе безвакуумного электродугового синтеза вещества. Среди преимуществ данного метода синтеза стоит отметить возможность его реализации его в открытой воздушной среде и относительно небольшое время его реализации. В качестве недостатка выделяется трудность масштабирования метода. Рабочий цикл при данном методе синтеза реализуется в ходе горения дугового разряда постоянного тока в полости графитового катода. Разряд инициируется путем перемещения анода вдоль оси тигля (катода) в его полости. Упрощенная схема установки представлена на рис. 1. Более подробно данный метод синтеза описан в предыдущих работах научной группы [1, 2].

Каждое соединение металла с бором или углеродом имеет свои необходимые значения температуры, при которых возможна реализация синтеза. Для достижения данных температурных значений электродуговому реактору, на котором реализуется синтез, задаются мощностные параметры, такие как напряжение, сила тока и время работы. Совокупность мощностных параметров, при которой возможно получение необходимого соединения, а также затрачивается минимальное количество энергии, является рекомендуемым режимом работы реактора. Поиск подобных режимов для различных веществ требует проведения большего количества экспериментов. Данный процесс занимает большое количество времени и несет за собой большие затраты энергии.

Возможным решением данной проблемы является создание математической модели, на которой возможно будет получать распределение температурного поля в системе при различных значениях подаваемой мощности.

При создании данной модели было решено упростить взаимодействие дугового разряда с поверхностью тигля до теплого потока, проходящего через поверхность тигля. Это допущение было сделано ввиду трудоемкости описания движения катодного пятна по поверхности. Теплота, передаваемая тиглю дугой, не будет сильно отличаться от потока мощности, проходящего через поверхность тигля, и данное допущение не внесет значительных изменений в расчет температурного поля системы. Такое упрощение задачи позволяет использовать для расчета уравнение теплопроводности. К уравнению теплопровод-

ности задавались начальные и граничные условия, определяющие температуру системы в начальный момент времени, тепловой поток через поверхность крышки и учет теплового излучения с поверхности тиглей. Расчет разработанной модели производился в “Comsol Multiphysics”. После создания 3D-модели системы тиглей рассчитывалось распределение температуры в системе при заданных параметрах силы тока — 150 А, напряжения — 30 В и время работы — 60 с. Результат расчета представлен на рис. 2.

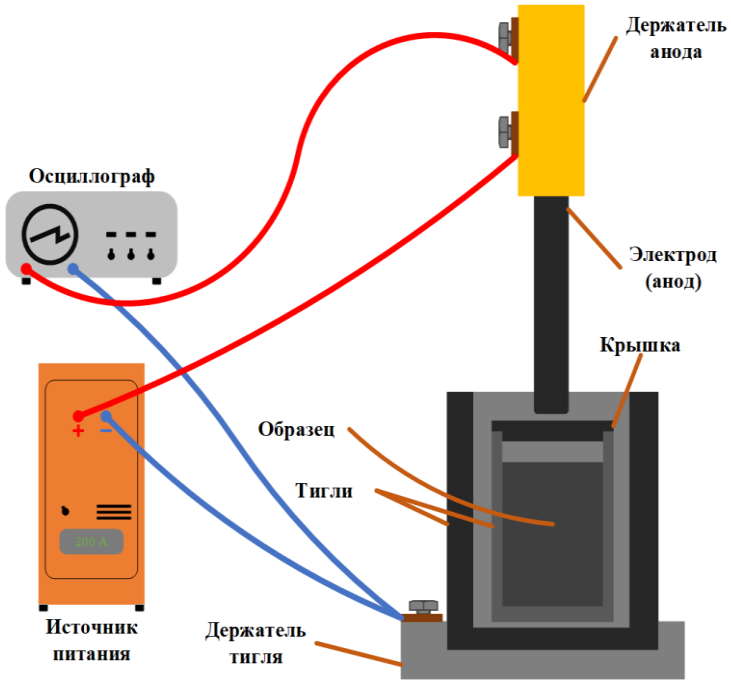


Рис. 1. Упрощенная схема установки

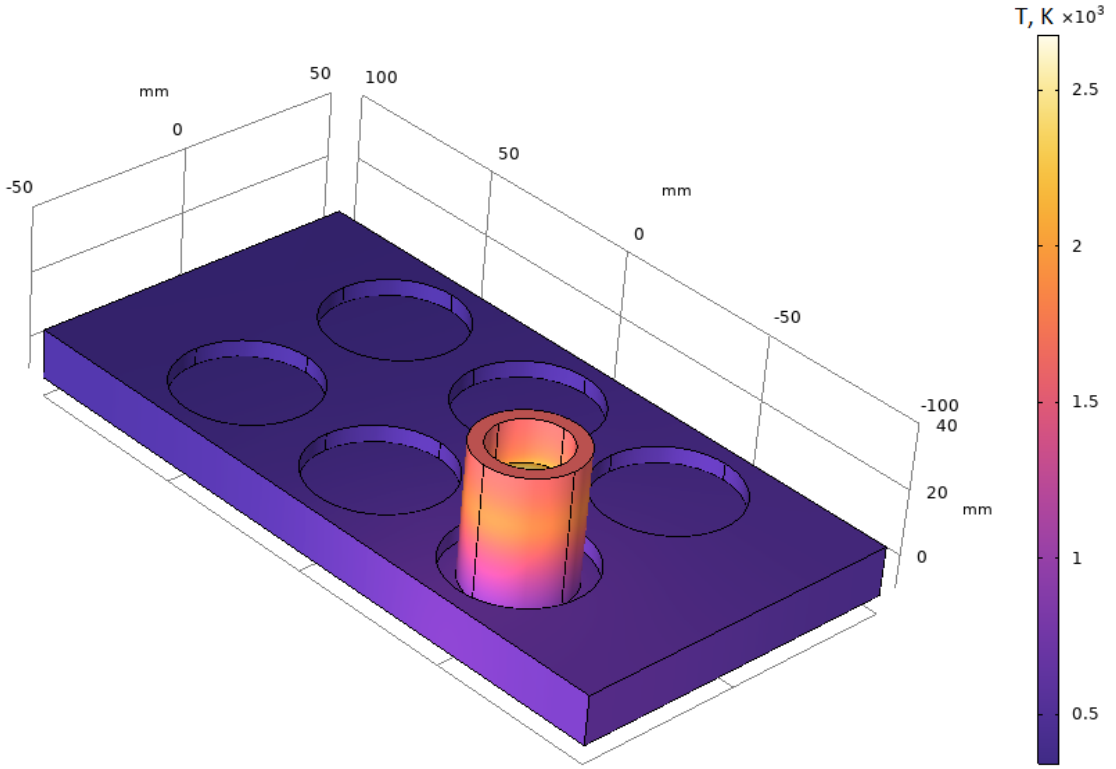


Рис. 2. Рассчитанное распределение температуры в системе тигля

Далее результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными измерения температуры, полученными в результате тепловизионной съемки в процессе синтеза при тех же мощностных параметрах. Результаты расчета температурного поля нормально сходятся со значениями температур, зафиксированными в процессе тепловизионной съемки.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Государственного задания вузам (проект № FSWW-2022-0018).

Литература

1. *Васильева Ю. З., Пак А. Я.* Синтез карбида молибдена в самоэкранирующейся электродуговой плазме // Материаловедение. Энергетика. 2021. Т. 27. № 2. С. 62–72.
2. *Pak A. Ya.* [et al.]. Energy-efficient direct current arc plasma synthesis of tantalum carbide powder by advanced vacuum-free method // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2023. V. 112. № 6.

УДК 537.52

Моделирование горения метана в присутствии электрического разряда

***Д. А. Тарасов*[1,2], *А. А. Фирсов*[1]**

[1]ОИВТ РАН

[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Использование электрических разрядов для воспламенения топливно-воздушных смесей и стабилизации горения в высокоскоростных потоках является актуальной задачей. В последние годы в области плазменно-стимулированного горения проводятся активные исследования [1]. Использование численного моделирования в этой области предоставляет хорошие возможности для изучения воздействия электрических разрядов на процессы горения.

Для моделирования горения метана в воздухе разработано большое количество схем реакций. Они сильно различаются по количеству элементарных реакций и областям их применимости — от одной брутто-реакции до набора из 325 реакций, включающих 53 вещества [2]. С прикладной точки зрения, в рамках решаемых задач при разработке коммерческих технических решений наибольший интерес представляли небольшие наборы реакций, качественно воспроизводящие тепловой эффект процесса горения и дающие оценки концентрации основных продуктов горения с меньшими затратами времени и вычислительных мощностей. Добавление электрического разряда в модель приводит к необходимости адаптации и усовершенствованию подходов, традиционно применяемых при моделировании горения. Это связано как с необходимостью учета как новых транспортных свойств веществ, таких как электропроводность, так и существенно большего диапазона температур.

Учитывая вышеизложенные замечания в данной работе для моделирования горения метана рассматривались схемы реакций с как можно меньшим количеством элементарных реакций, в то же время сохраняющие основные характеристики, такие как температура адиабатического горения, скорость фронта пламени и профили концентраций основных реактантов и продуктов горения. Выбор был сделан в пользу схемы из работы [3]. Она состоит из двух прямых и двух обратимых реакций и является актуальной модификацией хорошо зарекомендовавшего себя механизма горения Jones–Lindstedt (Jones and Lindstedt, 1988).

В данной работе проводилось моделирование горения метана в воздухе с использованием нескольких программных средств в разных постановках. Основным исследуемым продуктом являлся FlowVision, остальные продукты использовались для верификации получаемых результатов, первичного анализа схем химических реакций и некоторых других прикладных задач. FlowVision — коммерческий продукт, с недавнего времени позволяющий моделировать трехмерные течения химически взаимодействующих веществ (горение). Другое используемое программное решение — Python пакет Cantera [4]. Это набор инструментов с открытым исходным кодом для решения задач химической кинетики, термодинамики и процессов переноса. Он позволяет рассчитывать интересующие нас процессы химической кинетики, термодинамики и переноса в рамках ряда основных нольмерных и одномерных моделей.

Предварительное моделирование с целью верификации проводилось в двух постановках — 0D и 1D. Начальные условия для 0D расчетов и граничные условия на входе для 1D расчетов задавали следующие величины: температура — 837.81 K, давление — 2989087.5 Па, массовый расход (1D случай) — 13.028 кг/с, массовые доли — (H2 — 0.030018, O2 — 0.34967, H2O — 0.26207, CH4 — 0.34214, CO — 0.00020797, CO2 — 0.012741, N2 — 0.0012183, AR — 0.0019344). 0D расчеты проводились для постоянного объема V=const. Ниже на рис. 1 и рис. 2 представлено сравнение результатов расчета в FlowVision с Cantera в 0D и 1D постановках соответственно. По результатам моделирования видно отличие результатов расчета в двух пакетах для нульмерной постановки, что обусловлено различными механизмами

решения дифференциальных уравнений. Cantera использует адаптивный шаг по времени для получения заданной точности, в то время как FlowVision использует фиксированный шаг по времени. Тем не менее подобная точность разрешения по времени не имеет большого влияния при решении стационарных задач, что продемонстрировано на рис. 2 в одномерной постановке.

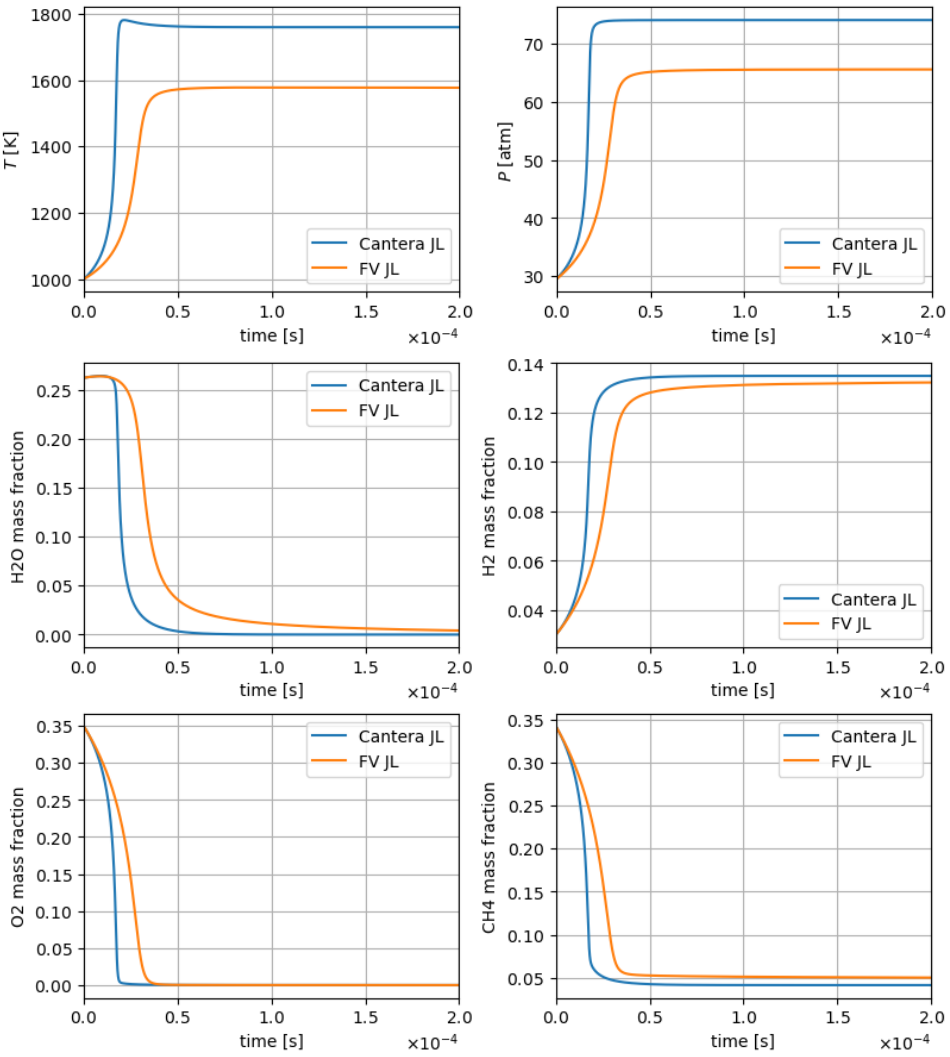


Рис. 1. Сравнение результатов расчета 0D горения в Cantera и FlowVision

Моделирование горения в присутствии электрического разряда было проведено с использованием пакета FlowVision. Модель плазмы и используемая электродинамическая модель брались в соответствии предыдущей работе авторов по моделированию продольного разряда [5]. Расчет проводился в двумерной осесимметричной постановке. Разряд был направлен вдоль потока и находился в его ядре. Электроды — цилиндрические с коническими концами диаметром 1 мм и 2 мм. В качестве области моделирования был выбран сектор цилиндра размерами 80 мм x 40 мм и с углом раствора 3,6 градуса. Выход из расчетной зоны — свободный. На боковых стенках сектора установлено условие симметрии, обеспечивающее нулевой градиент физических величин по нормали к границе. В качестве граничного условия для входа использовался сверхзвуковой вход с заданием температуры, распределения скорости, статического давления и концентраций веществ топливно-воздушной смеси. На входе задавались Pst = 22 КПа, M = 2, Tg = 170 К, соотношение массовой доли метана к массовой доли воздуха составляло 1:17. На переднем электроде использовалось граничное условие, задающее постоянный электрический ток 1 А. Второй электрод имел постоянный потенциал 0 В. Начальными условиями во всем объеме устанавливались параметры течения, соответствующие граничному условию на входе, расчетная область заполнялась воздухом. Начальный проводящий канал задавался установкой температуры в тонком цилиндре, соединяющем электроды. Геометрия расчетной области представлена на рис. 3. В данный момент обработка результатов проведенного расчета все еще продолжается.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-79-10408.

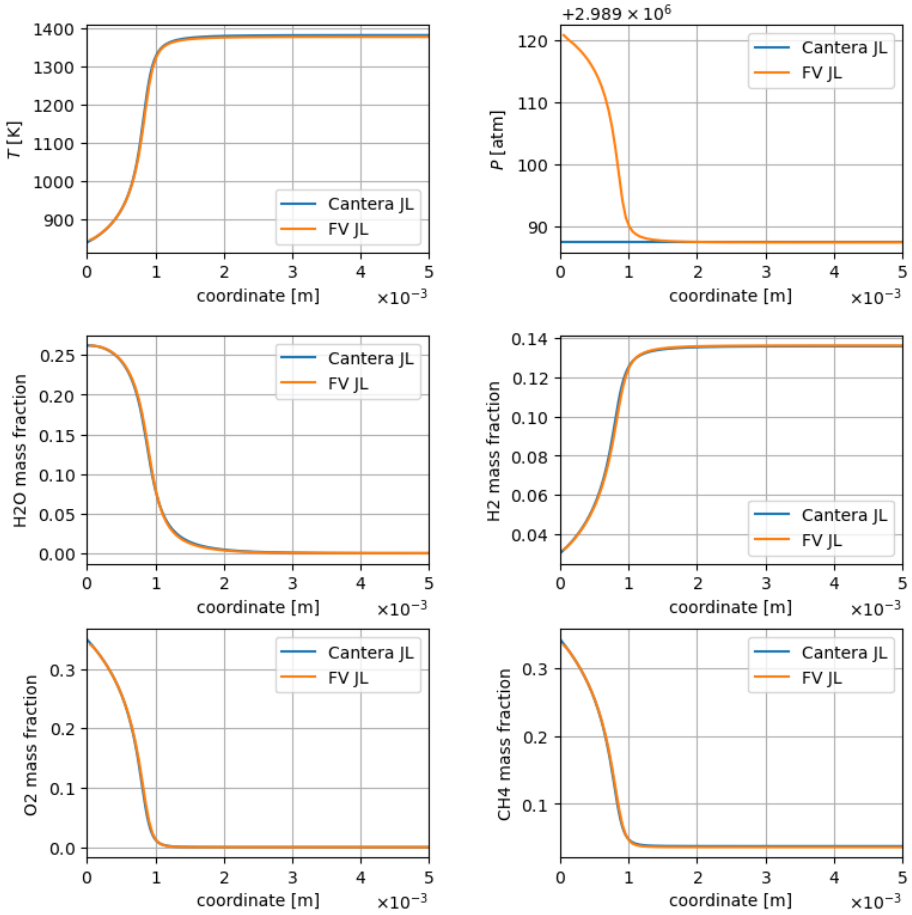


Рис. . Сравнение результатов расчета 1D горения в Cantera и FlowVision

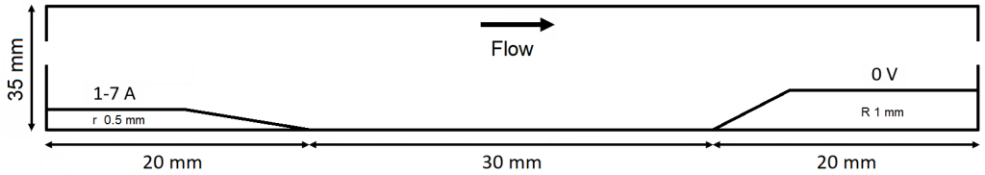


Рис. . Геометрия расчетной области осесимметричной 2D постановки с разрядом.

Литература

1. *Leonov S.B.* Electrically Driven Supersonic Combustion // Energies. 2018. V. 11(7): 1733.
2. *Gregory P. Smith.* [et al.]. GRI-Mech 3.0 Website. URL: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ (дата обращения: 15.02.2024).
3. *Wang L.* [et al.]. Comparison of Different Global Combustion Mechanisms Under Hot and Diluted Oxidation Conditions // Combustion Science and Technology. V. 184. P. 259–276.
4. *David G. Goodwin.* [et al.]. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes (3.0.0). Zenodo. 2023. DOI: 10.5281/zenodo.8137090.
5. *Firsov A., Bityurin V., Tarasov D.* [et al.]. Longitudinal DC Discharge in a Supersonic Flow: Numerical Simulation and Experiment // Energies. 2022. V. 15: 7015.

УДК 533.9.082

Эволюция активной броуновской системы в ВЧ-разряде

***Д. А. Заморин*[1,2], *Р. А. Сыроватка*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Проведена диагностика динамики структуры синтезированных активных частиц в разряде низкого давления, включающая в себя определение координат частиц и их траекторий. Данные, полученные с помощью диагностики, использовались для дальнейшей обработки результатов и изучения динамики плазменно-пылевой структуры.

Эксперимент проводился с меламинформальдегидными частицами диаметром d = 11.56 мкм, напыленными алюминием с помощью магнетрона, при постоянной мощности лазера W = 0.15 Вт в аргоновой плазме низкого давления (p = 2 ÷ 5 Па) ВЧ-разряда с частотой ν = 13,56 МГц.

Эксперимент со структурой активных частиц длился около полутора часов. За время проведения эксперимента структура перешла из состояния расплава в кристаллическое состояние с потерей активных свойств, предположительно, из-за модификации поверхности частиц в газоразрядной камере [1].

Для оценки динамики структуры и ее свойств на основе координат и траекторий, полученных при диагностике, были вычислены: парная корреляционная функция g(r), функция ван Хоува $G(r,t)$ [2], ориентационная корреляционная функция g_6 [3], эффективный параметр неидеальности Γ^* [4] и среднеквадратичное смещение $< r^2 >$:

$$g(r) = \frac{N(r,r+dr)}{2\pi r dr\, {}^{N}/_{S}}, \quad (1)$$

$$g_6 = < \psi_6 {\psi^*}_6 >, \quad (2)$$

$$\Psi_6 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} exp(6i\,\theta_j), \quad (3)$$

$$G = G_s + G_d = \frac{1}{N} < \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)) > + \frac{1}{N} < \sum_{i\neq j}^{N} \delta\left(\vec{r} - \left(\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(0)\right)\right) >, \quad (4)$$

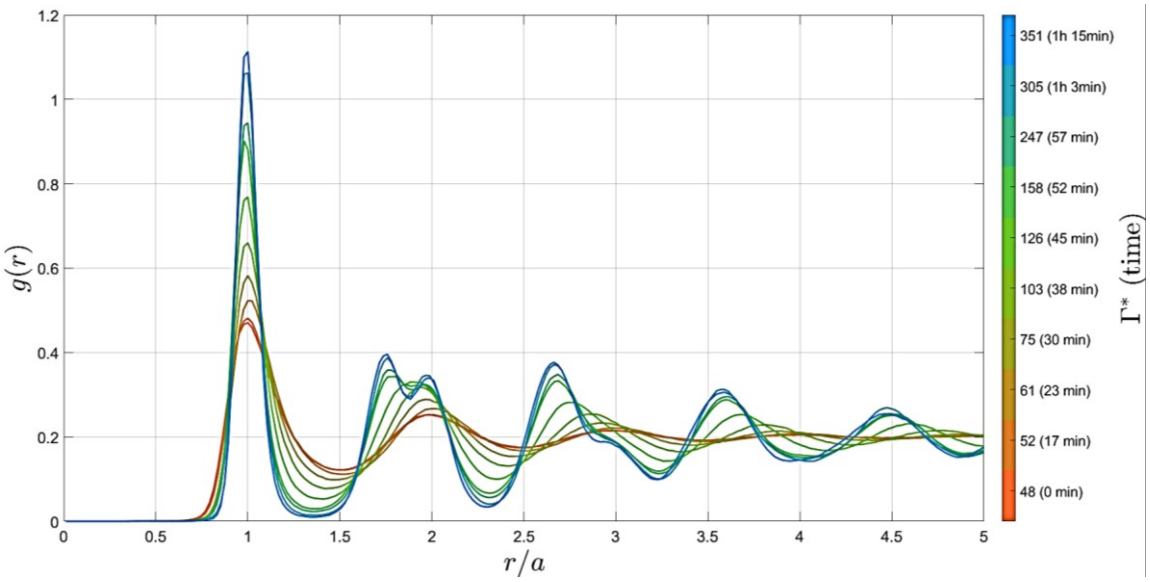


Рис. 1. Парная корреляционная функция g(r) и Γ* от времени (шкала справа)

Здесь N — число частиц в наблюдаемой области, S — площадь этой области, N (r, r + dr) — число частиц в кольце, n — число соседних частиц, θ_j — угол между выбранной частицей и j-й соседней частицей, G_s и G_d — соответственно собственная и несобственная части функции ван Хоува. Эффективный параметр неидеальности Γ^* определялся из парной корреляционной функции: $\Gamma^* = f\left(\frac{g_{max}}{g_{min}}\right)$, где g_{max} — первый максимум парной корреляционной функции g(r), вычисленной по формуле (1), а g_{min} — ее первый минимум, f — функция, определенная численным моделированием для трехмерных и квазидвумерных структур. В работе использовались данные для квазидвумерной структуры.

Вычисленный по парной корреляционной функции (на рис. 1) параметр неидеальности Γ* монотонно растет за все время эксперимента от 50 до 350. Анализ собственной части функции ван Хоува позволяет установить, является ли система динамически неоднородной [5]: если эту функцию на малых временах (менее 1 с) удается аппроксимировать гауссовой функцией, то система является динамически однородной, в обратном случае — динамически неоднородной. В данном эксперименте при t = 7 мин (рис. 2*а*) система является динамически однородной, при t = 53 мин (рис. 2*б*) система является динамически неоднородной: наблюдается более медленный, экспоненциальный спад функции.

Среднеквадратичное смещение структуры $< r^2 > \sim t^2$ на малых временах (менее 1 с) и $< r^2 > \sim t$ на средних временах (порядка 1–10 с) для структуры до 45 мин, что характерно для структур активных частиц [6]. Для структуры после 45 мин $< r^2 > \sim t^2$ на средних временах, что может быть связано с динамической неоднородностью системы (рис. 3а). Анализ ориентационной корреляционной функции показывает, что для структуры до 45 мин со времени начала эксперимента g_6 убывает монотонно, после 45 мин — немонотонно. Предположительно, структура кристаллизовалась при t = 45 мин.

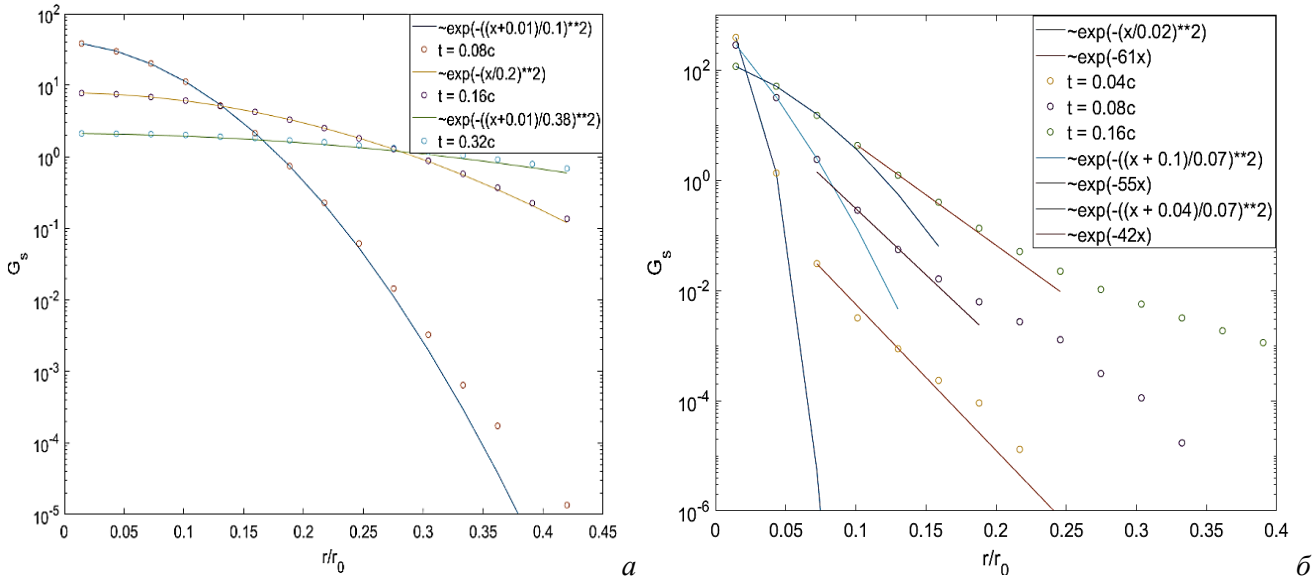


Рис. 2. (*а*) G_s для t = 7 мин; (*б*) G_s для t = 53 мин

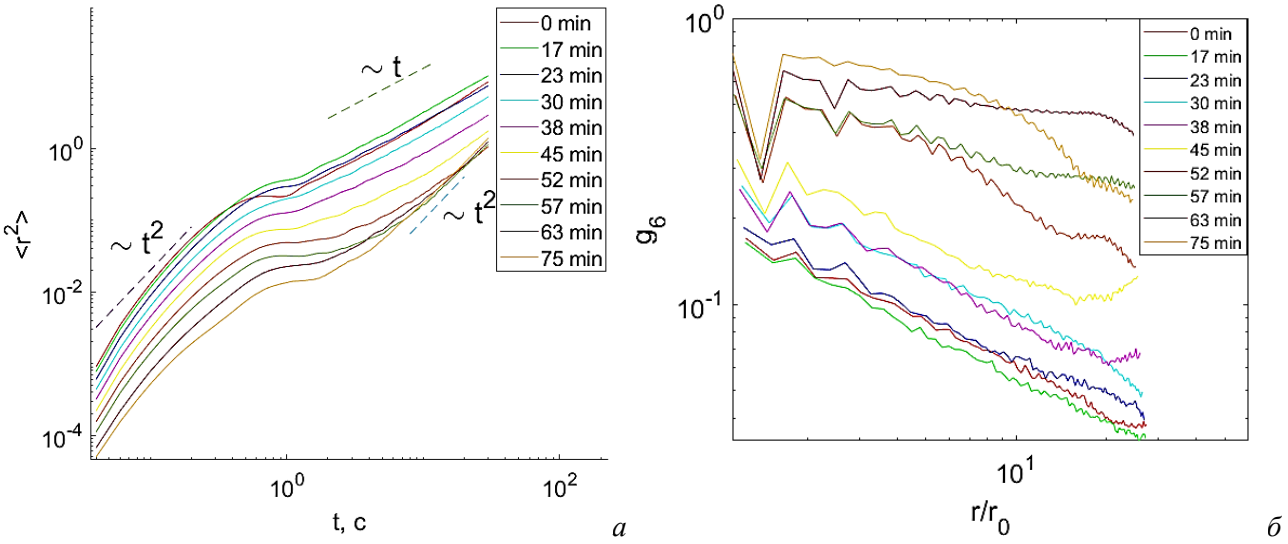


Рис.3. Среднеквадратичное смещение (*а*); ориентационная корреляционная функция g_6 (*б*)

Литература

1. *Kononov E.A., Vasiliev M.M, Vasilieva E.V.* [et al.]. Particle Surface Modification in the Near-Electrode Region of an RF Discharge // nanomaterials 2021. V. 11(11): 2931.
2. *Walter K., Andersen H.* Testing mode-coupling theory for a supercooled binary Lennard-Jones mixture I: The van Hove correlation function // Phys.Rev. 1995. V. 51(5). P. 4632–4638.

3. *Sheng-Yuan Z., Chih-Hao H., Ten-Ming W.* Bond Orientational Order Parameters for Classifying Solid-like Clusters in a Lennard-Jones System near Liquid−Solid Transition and at Solid States // J. Phys. Chem. A. 2022. V. 126(12). DOI: 10.1021/acs.jpca.1c09527.
4. *Vaulina O.S., Dranzhevski I.E.* Transport of macroparticles in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Physica Scripta 2006. V. 73. P. 577–586.
5. *Bhowmik B., Tah I., Karmakar S.* Non-Gaussianity of the van Hove function and dynamic-heterogeneity length scale // Phys.Rev. 2018. V. 98(2): e022122.
6. *Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H.* [et al.]. Active particles in complex and crowded environments // Rev. of Mod. Ph. 2016. V. 88(4): e045006.

УДК 536.71

Уравнение состояния жидкого никеля при высоких давлениях и температурах

***К. А. Боярских*[1,2], *К. В. Хищенко*[1,2,3]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

В работе рассматривается уравнение состояния жидкой фазы никеля на основе простых моделей, представленных различными вариантами функции давления (P) от удельного объема (V) и температуры (T). Для каждой рассматриваемой модели построены простейшие зависимости удельной внутренней энергии (E) от V и T. Это сделано путем введения дополнительного параметра, имеющего смысл постоянной удельной изохорной теплоемкости. Таким образом, получены термодинамически согласованные модели уравнений состояния.

В рамках рассматриваемых теоретических концепций проведен расчет параметров, позволяющих описать теплофизические свойства жидкого никеля при высоких давлениях и температурах. Для расчета параметров (констант) моделей использован стохастический алгоритм, написанный на основе метода роя частиц [1, 2], предназначенный для решения задач оптимизации. Он предполагает использование векторов («частиц»), перемещающихся случайным образом в пространстве параметров решаемой задачи, для нахождения минимума заданного функционала. В настоящей работе этот функционал представляет собой отклонение результатов расчетов, проведенных в рамках рассматриваемых моделей, от экспериментальных данных по изобарическому расширению жидкой фазы металла:

$$\Delta\rho^2 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{\rho_{i-1}(T_i - T_n) - \rho_i(T_{i-1} - T_n) - \rho_n(T_i - T_{i-1})}{T_i - T_{i-1}}\right]^2,$$

где $\rho = 1/V$ — плотность; N — число точек из эксперимента по изобарическому расширению жидкой фазы никеля; индекс n относит величину к экспериментальным измерениям, а индексы i и $i - 1$ — к результатам расчетов по уравнению состояния. Интервал температур, для которого проводятся расчеты, включает все экспериментальные точки. Он разбивается на такое число участков, чтобы результат расчета отклонения (1) не зависел от числа участков. В качестве оптимального набора коэффициентов выбирается тот, который соответствует наименьшему значению $\Delta\rho^2$.

В результате отыскания параметров моделей рассчитаны кривые, описывающие ударно-волновые процессы. На основании сравнения результатов расчетов с данными по ударному сжатию и изоэнтропическому расширению ударно-сжатых исходно пористых образцов никеля определены границы областей применимости разработанных уравнений состояния. Полученные в работе результаты могут быть использованы при численном моделировании процессов, сопряженных с достижением высоких плотностей энергии.

Литература

1. *Kennedy J., Eberhart R.* Particle swarm optimization // Proc. of ICNN'95 — Int. Conf. on Neural Networks, Perth, WA, Australia, 1995. V. 4. P. 1942–1948.
2. *Eberhart R., Kennedy J.* A new optimizer using particle swarm theory // Proc. of MHS'95 — The Sixth Int. Symp. on Micro Machine and Human Science, Nagoya, Japan, 1995. P. 39–43.

УДК 533.697/.9

Поиск оптимальных частот в задаче интенсификации смешения поперечной струи со сверхзвуковым потоком с помощью локального импульсного энерговыделения

***Л. С. Волков*[1,2], *А. А. Фирсов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Импульсно-периодический локальный нагрев — один из перспективных способов интенсификации смешения газов в конфигурации течения, формирующегося при взаимодействии сверхзвукового потока воздуха с поперечной вторичной струей газа, инжектируемой в этот поток через отверстие на плоской стенке [1]. Интенсификация смешения обусловлена тем, что в результате импульсного энерговыделения (например, при искровом разряде) образуется ударная волна и расширяющаяся тепловая каверна [2]. В статье [3] на примере течения с коэффициентом динамического напора J ~ 1 было показано, что искровой разряд, локализованный на передней кромке отверстия инжектора вторичной струи, способен приводить к возбуждению неустойчивости течения и повышать значение интегрального критерия эффективности смешения η_m.

Одну и ту же среднюю мощность энерговклада можно распределить во времени разными способами: например, в виде редких и мощных импульсов, или наоборот, в виде сравнительно слабых импульсов со специально подобранной частотой. Цель данной работы состояла в параметрическом исследовании влияния частоты искрового разряда на эффективность смешения вторичной струи со сверхзвуковым потоком воздуха при нескольких значениях коэффициента динамического напора и неизменной средней мощности энерговклада.

Для численного моделирования использовался российский многодисциплинарный программный комплекс FlowVision 3.13. Для расчета эволюции локальных характеристик течения применялся метод нестационарных уравнений Навье-Стокса (УНС), осредненных по Рейнольдсу (URANS) и замкнутых моделью турбулентности KEFV [4]. Валидация указанного метода расчета в исполнении FlowVision на примере классического частного случая поперечной струи в сверхзвуковом потоке была продемонстрирована в статье [3].

Характеристики сверхзвукового потока воздуха и вторичной струи соответствовали возможностям аэродинамической трубы ИАДТ-50 в ОИВТ РАН. У входного потока воздуха: скорость 500 м/с, давление 22 кПа, температура 170 К. Диаметр отверстия инжектора вторичной струи D = 3 мм. В качестве газа вторичной струи выбран CO_2 как модельное вещество, имитирующее горючее топливо. Массовый расход CO_2 варьировался от 2 до 4 г/с, таким образом коэффициент динамического напора J составлял от 0,7 до 1,3.

Для учета локального импульсного энерговклада был использован модификатор, добавляющий в УНС член с объемным источником тепла в заданном объеме: цилиндре со скругленными торцами длиной 3 мм и радиусом 0,8 мм (красная область на рис. 1). Средняя мощность тепловыделения составляла 1 кВт, но была распределена неравномерно во времени. Частота импульсов энерговыделения варьировалась от 10 до 60 кГц. Длительность каждого импульса составляла 2 мкс.

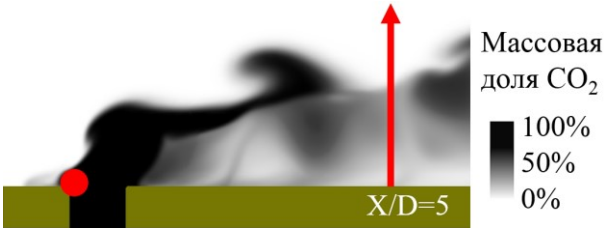


Рис. 1. Распределение массовой доли CO_2 в плоскости симметрии и место для импульсного нагрева

Для заданной плоскости X/D=5, обозначенной стрелкой на рис. 1, была построена зависимость (рис. 2) усредненной во времени интегральной эффективности смешения η_m от частоты импульсного нагрева при неизменной средней мощности тепловыделения. Таким образом, для нескольких значений J были выявлены оптимальные частоты тепловыделения. Также была проанализирована роль различных механизмов распространения возмущений от локального импульсного нагрева. Были выявлены некоторые основные механизмы, приводящие к изменению формы границы струи и соответствующим изменениям эффективности смешения.

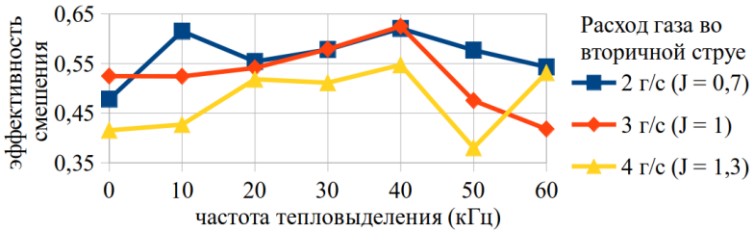


Рис. 2. Зависимость интегральной эффективности смешения η_m в плоскости X/D = 5 от частоты тепловыделения при неизменной средней мощности тепловыделения для нескольких расходов газа вторичной струи, соответствующих разным значениям коэффициента динамического напора J. Нулевая частота на графике соответствует случаю отсутствия тепловыделения.

Исследование поддержано грантом РНФ №21-79-10408.

Литература

1. *Cai Z.* [et al.]. Numerical Study on Transverse Jet Mixing Enhanced by High Frequency Energy Deposition // Energies. 2022. V. 15(21): 8264. DOI: 10.3390/en15218264.
2. *Dolgov E. V., Firsov A. A.* Numerical study of hydrodynamic perturbations caused by filiform spark. discharge near wall // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 1112(1):012026. DOI: 10.1088/1742-6596/1112/1/012026.
3. *Волков Л. С., Фирсов А. А.* Моделирование влияния импульсно-периодического нагрева на формирование возмущений на границе поперечной струи в сверхзвуковом потоке // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15. № 4. С. 845–860.
4. *Жлуктов С. В., Аксенов А. А.* Пристеночные функции для высокорейнольдсовых расчетов в программном комплексе FlowVision // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7. № 6. С. 1221–1239.

УДК 533.9…15

Экспериментальное исследование крупномасштабной вращающейся плазменной структуры в асимметричной конфигурации отражательного разряда с термокатодом

***М. А. Валинуров*[1,2], *Р. А. Усманов*[1], *А. П. Ойлер*[1,2], *А. В. Гавриков*[1]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Сегодня одним из актуальных направлений исследований является низкотемпературная плазма в скрещенных **E**x**B** полях. Зачастую в практических приложениях используется цилиндрическая геометрия, причем электрическое поле направлено вдоль радиальной оси, а магнитное вдоль аксиальной. В данной геометрии возникает дрейф заряженных частиц, что может приводить к различным плазменным неустойчивостям [1], тем самым ухудшая работу устройств, использующих такую конфигурацию полей. В качестве примеров подобных устройств можно привести ускорители Холла [2], плазменные центрифуги [3] и масс-сепараторы Окавы [4] и Смирнова [5].

Ранее мы установили, что при симметричной конфигурации отражательного разряда Пеннинга с термокатодом, существующим в объеме, превышающем 1 м^3, возникает «спицевая» неустойчивость, имеющая дрейфовую природу [6]. «Спицей» мы называем крупномасштабную структуру, которая представляет из себя вращающийся в круговом сечении сектор с измененным потенциалом плазмы. Было выдвинуто предположение, что данную неустойчивость можно подавить, нарушив симметрию. Целью работы было исследовать неустойчивость в асимметричной конфигурации разряда Пеннинга, существующей в большом объеме.

Эксперименты проводились в заземленной вакуумной камере длиной около 200 см и диметром 86 см. На торцах располагались кольцевые электроды и термокатод из LaB_6, смещенные так, что ось разряда располагалась на расстоянии 14 см от оси камеры. Отражательный разряд существовал в аргоне при давлении 0.3 мТорр и магнитном поле 900–1400 Гс. Напряжение на электродах было порядка –600 В, при токе разряда порядка 10 А [7]. В работе измерялись колебания плавающего потенциала при помощи системы плавающих зондов, их электрическая схема и расположение в камере приведены на рис. 1.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что в асимметричной конфигурации данная неустойчивость проявляется не во всем плазменном объеме.

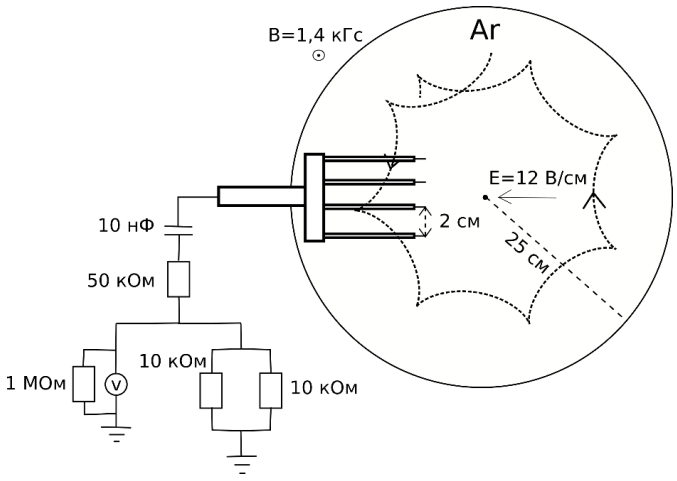


Рис. 1. Схема измерений 4-канальным плавающим зондом

Литература

1. *Kaganovich I. D.* [et al.]. Physics of E× B discharges relevant to plasma propulsion and similar technologies // Physics of Plasmas. 2020. Т. 27. № 12.
2. *Choueiri E. Y.* Plasma oscillations in Hall thrusters // Physics of Plasmas. 2001. Т. 8. № 4. С. 1411–1426.
3. *Krishnan M., Geva M., Hirshfield J. L.* Plasma centrifuge // Physical Review Letters. 1981. Т. 46. № 1. С. 36.
4. *Ohkawa T., Miller R. L.* Band gap ion mass filter // Physics of Plasmas. 2002. Т. 9. № 12. С. 5116–5120.
5. *Liziakin G. D.* [et al.] On the Concept of Plasma Mass-Separation in Crossed E× B Fields with a Potential Well (a Review) // Plasma Physics Reports. 2022. Т. 48. № 11. С. 1251–1260.
6. *Валинуров М. А.* [и др.]. Распространение фронта азимутальных колебаний потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом // Современные средства диагностики плазмы и их применение. 2022. С. 34–36.
7. *Valinurov M. A.* [et al.]. Plasma Potential Fluctuations in a Reflex Discharge with Thermionic Cathode // Plasma Physics Reports. 2023. Т. 49. № 5. С. 649–655.

УДК 536.71

Уравнение состояния смеси кварца с алюминием при высоких плотностях энергии

***Н. Н. Середкин*[1], *К. В. Хищенко*[1,2,3]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

В настоящей работе представлена модель термодинамики системы Al–SiO_2, являющейся двухкомпонентной смесью алюминия (Al) и кварца (SiO_2) с различными массовыми долями. Модель включает в себя уравнения состояния для компонентов смеси. Предлагаемые уравнения состояния могут использоваться для замыкания уравнений движения (законов сохранения массы, импульса и энергии) в численном моделировании ударно-волновых процессов при высоких плотностях энергии [1–3].

Уравнения состояния компонентов смеси представлены в форме $E = E(V, T)$ и $P = P(V, T)$, где E — удельная внутренняя энергия; P — давление; V — удельный объем; T — температура. Удельная внутренняя энергия и давление компонентов задаются в виде сумм трех слагаемых [4]:

$$E(V,T) = E_c(V) + E_a(V,T) + E_e(V,T), \quad P(V,T) = P_c(V) + P_a(V,T) + P_e(V,T) \qquad (1)$$

где E_c и P_c — упругие составляющие энергии и давления при $T = 0$; E_a и P_a — тепловой вклад тяжелых частиц (атомов, ионов); E_e и P_e — тепловой вклад электронов.

Уравнение состояния для смеси N компонентов задается в виде сумм удельной внутренней энергии (E_i) и удельного объема (V_i) компонентов с учетом их массовых долей (α_i):

$$E_{1N}(P,T) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i E_i(P,T), \quad V_{1N}(P,T) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i V_i(P,T), \qquad (2)$$

где E_{1N} и V_{1N} — удельная внутренняя энергия и удельный объем смеси.

Модель термодинамики (1) и (2) может использоваться для описания термодинамических характеристик алюминия, кварца и их смесей с различными массовыми долями компонентов. Полученные

результаты расчета ударных адиабат для указанных веществ находятся в хорошем согласии с имеющимися ударно-волновыми экспериментальными данными при высоких плотностях энергии.

Литература

1. *Бушман А. В., Фортов В. Е.* Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140. № 2. С. 177—232.
2. *Фортов В. Е.* Физика высоких плотностей энергии — М.: Физматлит, 2013.
3. *Хищенко К. В.* Уравнение состояния алюминия при высоких давлениях // ТВТ. 2023. Т. 63. № 3. С. 477—480.
4. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений — М.: Физматлит, 2008.

УДК 536.41, 536.42

Экспериментальное исследование изменения плотности тугоплавких металлов при высоких температурах и в жидкой фазе

С. А. Мельников, В. Н. Сенченко

Объединенный институт высоких температур РАН

Исследование теплового расширения тугоплавких металлов проводилось методом импульсного нагрева. Метод импульсного нагрева заключается в быстром нагреве проводящих образцов пропусканием импульса тока длительностью несколько десятков микросекунд. Нагрев происходит достаточно быстро, чтобы можно было пренебречь тепловыми потерями за счет теплопроводности в местах крепления образца за время проведения эксперимента, а также это позволяет проводить измерения при плавлении и в жидкой фазе, так как цилиндрический образец сохраняет первоначальную форму. Для гафния в качестве образцов использовались выпрямленные не отожженные отрезки гафниевой проволоки (ГФИ-1) длиной около 10 мм и диаметром 0,5 мм. Образец жестко закреплялся с двух концов в медных цангах. При нагреве измерялись ток, падение напряжения на образце, температура и ширина образца. Используя полученные данные, можно найти удельную энтальпию, удельное сопротивление и коэффициент линейного расширения исследуемых материалов. Термограмма нагрева, а также графики тока и напряжения одного из экспериментов с гафнием показаны на рис. 1.

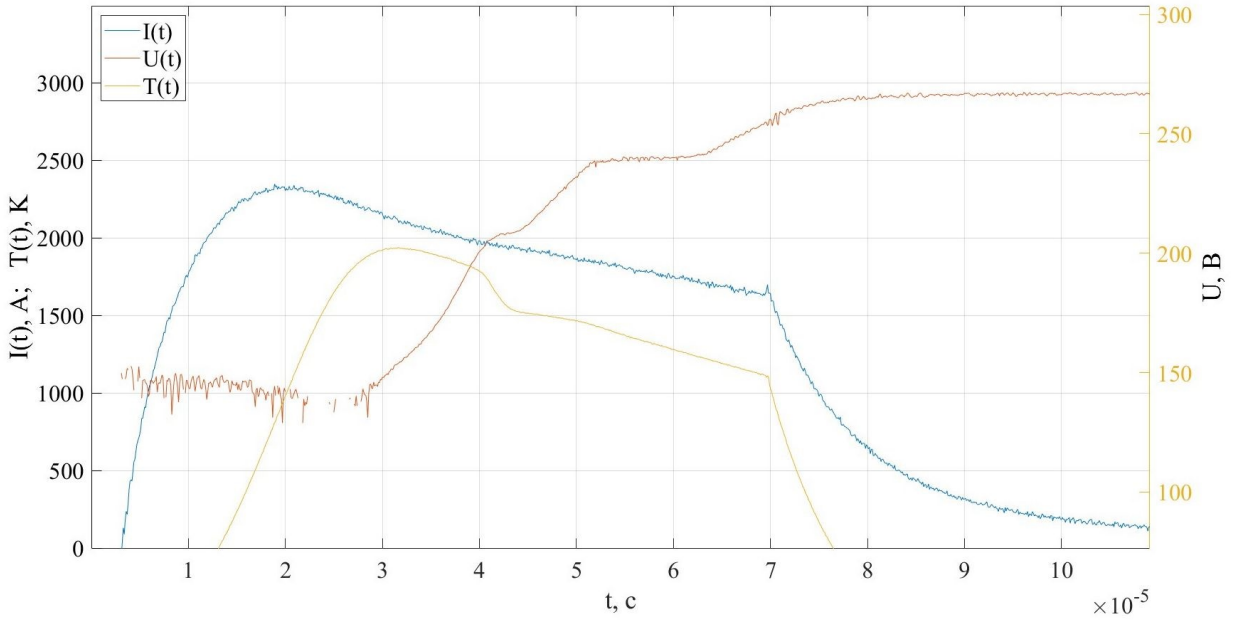


Рис. 1. Зависимость температуры, тока, и падения напряжения на образе от времени в эксперименте с гафнием (Hf)

Измерение расширения проводилось методом теневой фотосъемки высокоскоростной видеокамерой при разрешении 1280x2 пикселя со скоростью 250000 кадров в секунду и с использованием лазерной подсветки. Ширина изображения образца составляла около 400 пикселей. Результаты теневой фотосъемки в виде склейки 20 последовательных кадров (80 мкс) показаны на рис. 2.



Рис. 2. Результат теневой фотосъемки

Были получены экспериментальные данные по тепловому расширению ряда тугоплавких металлов при высоких температурах и в жидкой фазе, в частности для гафния. Полученные экспериментальные данные для плотности гафния показаны на рис. 3.

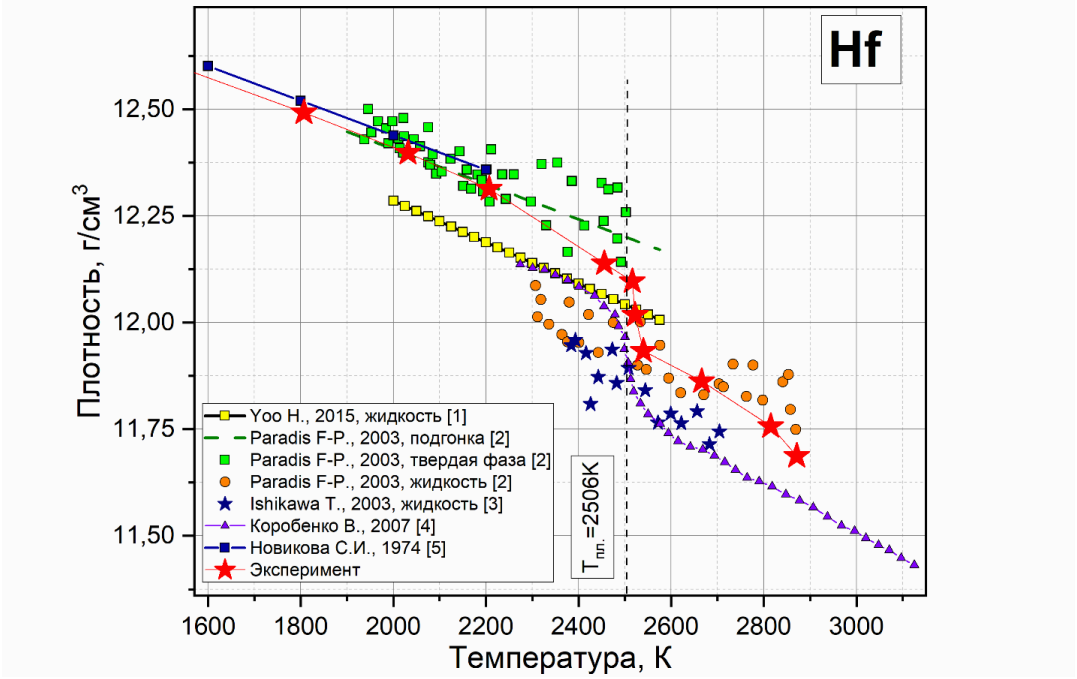


Рис. 3 Данные эксперимента и их сравнение с литературными данными

Хорошее согласие полученных в эксперименте результатов с литературными данными показывает эффективность метода импульсного нагрева и экспериментальной установки для исследования теплофизических свойств тугоплавких металлов при высоких температурах и в жидкой фазе.

Литература

1. *Yoo H., Park C., Jeon S., Lee S., Lee G. W.* Uncertainty evaluation for density measurements of molten Ni, Zr, Nb and Hf by using a containerless method // Metrologia. 2015. V. 52(5). P. 677–684.
2. *Paradis P. F., Ishikawa T., Yoda S.* Non-contact measurements of the thermophysical properties of hafnium-3 mass% zirconium at high temperature // Int. J. Thermophys. 2003. V. 24. P. 239–258.
3. *Ishikawa T., Paradis P. F., Itami T., Yoda S.* Thermophysical properties of liquid: comparison between hard sphere model calculation and electrostatic levitation measurements // J. Chem. Phys. 2003. V. 118. P. 7912–7920.
4. *Савватимский А. И., Коробенко В. Н.* Плотность жидкого гафния от точки плавления до точки кипения // ТВТ. 2007. Т. 45(2). С. 187–192.
5. *Новикова С. И.* Тепловое расширение твердых тел. — М.: Наука. 1974.

УДК 532.529.5

Изменение характера движения в системе активных броуновских частиц при внешнем воздействии

***Р. В. Сеношенко*[1,2], *Е. А. Кононов*[1,2], *М. М. Васильев*[1], *О. Ф. Петров*[1,2]**

[1]Объединенный институт высоких температур РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Активные системы находятся в термодинамически неравновесном состоянии и способны преобразовывать поступающую извне энергию в собственное направленное движение [1]. Подобная система является коллоидной в том случае, если она состоит из дисперсных микрочастиц, распределенных в непрерывной

дисперсионной среде. Динамические характеристики и свойства природных коллоидных систем во многом идентичны искусственным лабораторным. В подобных активных коллоидных системах возможно наблюдать различные типы коллективного движения, в том числе роение и образование вихрей [2]. Вихревые структуры также можно наблюдать как в живых системах, так и в искусственных активных коллоидных структурах.

Экспериментально наблюдалось изменение характера движения в системе из стабилизированных микрочастиц меламин-формальдегида с частичным медным покрытием, погруженных в жидкую вязкую среду (минеральное масло), находящихся под воздействием лазерного излучения. Система полностью находилась в области действия лазерного излучения на протяжении всего времени наблюдения. Металлическая поверхность частиц при воздействии лазера нагревалась, что приводило к возникновению локального температурного градиента. Исходная структура после включения лазера начинала однонаправленное замкнутое движение. После некоторого времени система разделялась на два вихря, вращающихся в разных направлениях. Скорости частиц при обоих режимах движения не изменялись.

Были получены координаты движения частиц в каждый момент времени, построены и проанализированы их траектории. Для обоих типов движения были рассчитаны скорости и энергии частиц, построены зависимости их среднеквадратичного смещения. Также были рассчитаны средние кинетические энергии и коэффициенты диффузии для системы коллоидных частиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-12-00372).

Литература

1. *Bechinger C.* [и др.]. Active Particles in Complex and Crowded Environments // Rev. Mod. Phys. 2016. V.88: 045006.
2. *Bayındır L.* A review of swarm robotics tasks // Neurocomputing 2016 V. 172. P. 292–321.

УДК 533.922

Механизм формирования цепочечных структур в плазме тлеющего разряда постоянного тока

В. В. Литвиненко, М. М. Васильев, А. В. Федосеев, О. Ф. Петров

Объединенный институт высоких температур РАН

Цепочечные структуры частиц в лабораторной плазме чаще всего формируются вдоль внешнего электрического поля. [1] За каждой отрицательно заряженной пылевой частицей вследствие фокусировки положительно заряженных ионов может формироваться ионный «вейк». Данное явление изменяет пространственное распределение электрического потенциала вокруг частицы.

В настоящее время считается, что формирование ионных «вейков» усиливает взаимодействие между пылевыми частицами и приводит к их самоорганизации в квазиодномерные цепочечные структуры. [2] Однако явление сохранения структурных характеристик цепочки, в частности межчастичного расстояния, при удалении одной из центральных частиц ее формирующих, на данный момент исследовано не было.

В данной работе представлены первые экспериментальные наблюдения по формированию устойчивых «вакансий» в одномерной цепочечной структуре пылевых частиц. Также описано явление последующего обмена позициями двух соседних частиц, без изменения структурных свойств цепочки.

В плазме тлеющего разряда постоянного тока была сформирована одноцепочечная структура, состоящая из 5 монодисперсных частиц. Для визуализации цепочки частицы были подсвечены рассеянным лазерным излучением. Изображение частиц фиксировалось цифровой видеокамерой. С помощью обработки видеоизображений были определены положения частиц в каждый момент времени и, таким образом, восстановлены траектории движения каждой из частиц, формирующих цепочку.

При помощи сфокусированного лазерного пучка из цепочки была «выбита» центральная частица. Экспериментально обнаружено, что это привело к формированию «вакансии». Для объяснения данного явления была проведена оценка основных параметров пылевых частиц и плазмы газового разряда. Был проведен расчет пространственного распределения электрического потенциала вокруг одиночной частицы. На основе полученных данных было показано, что наблюдаемые явления происходят в режиме сильного ионного «вейка», в связи с чем было сделано следующее предположение о возможном механизме формирования цепочечных структур. [3]

Литература

1. *Salnikov M., Fedoseev A., Sukhinin G.* Plasma Parameters around a Chain-Like Structure of Dust Particles in an External Electric Field // Molecules. 2021. V. 26(13): 3846.
2. *Fedoseev A. V.* [et al.]. Structural properties of a chain of dust particles in a field of external forces // Physical Review E. 2022. V. 106(2): 025204.
3. *Fedoseev A. V.* [et al.]. Mechanism of formation in plasma of quasi 1D string-like structures and stable vacancies in them // Scientific reports. 2024 (in press).

Секция проблем безопасного развития атомной энергетики

Председатель: Л. А. Большов (д. ф.-м. н., академик РАН)

Зам. председателя: А. С. Филиппов (д. т. н., профессор)

Секретарь: И. Г. Обухова

Дата: 03.04.2024 Время: 10:00

УДК 539.32

Аналитическое решение уравнений упругости для цилиндрически-ортотропного материала, имитирующего топливную таблетку с трещинами

***К. А. Данилов*[1,2], *В. Г. Зборовский*[2], *К. Е. Улыбышев*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]НИЦ Курчатовский институт

Атомные электростанции играют огромную роль в жизни человека. Для того, чтобы обеспечивать высокий уровень безопасности, нужно, в числе прочего, знать и предсказывать механическое поведение таблеток ядерного топлива. Сам по себе, материал в таблетке изотропен. При эксплуатации таблетки в реакторе возникают термические напряжения, которые приводят к образованию нескольких крупных трещин. Это меняет механическое поведение таблетки. Для его описания используются различные подходы [1]. Во-первых, применяется 3D — моделирование топливного стержня с трещинами. Во-вторых, для экспресс-оценки деформаций фрагментированной таблетки развиваются упрощенные 1,5D методы, основанные на гомогенизации таблетки и использовании материала с эффективными свойствами [1,2].

В данной работе мы моделируем таблетку как цилиндр без трещин из цилиндрически-ортотропного материала. У него модули Юнга различаются по направлениям: по радиусу, по окружности, вдоль оси. Вводится параметр γ (вообще говоря, зависящий от радиуса), который описывает относительное «ослабление» жесткости таблетки с трещинами. Данный материал обладает симметрией, связанной с тремя взаимно-перпендикулярными плоскостями, однако эти плоскости симметрии «поворачиваются» вместе с локальной системой координат. Поэтому он оказывается цилиндрически симметричным и локально ортотропным. Примером такого материала является древесина.

Целью работы является нахождение и верификация аналитических зависимостей, описывающих напряженно-деформированное состояние таблетки из цилиндрически-ортотропного материала. В дальнейшем предполагается их реализация как подпрограмм в интегральном ТВЭЛьном коде.

В данной работе получена матрица податливости цилиндрически-ортотропного материала, фрагмент которой приведен далее:

$$S' = 1/E \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\upsilon}{\sqrt{\gamma}} & -\frac{\upsilon}{\sqrt{\gamma}} \\ -\frac{\upsilon}{\sqrt{\gamma}} & \frac{1}{\gamma} & -\frac{\upsilon}{\gamma} \\ -\frac{\upsilon}{\sqrt{\gamma}} & -\frac{\upsilon}{\gamma} & \frac{1}{\gamma} \end{pmatrix}$$

где E — модуль Юнга и υ — коэффициент Пуассона исходного изотропного материала без учета трещин. Коэффициент γ определяет сотношения между инженерными модулями [3]:

$$\frac{E_\theta}{E_r} = \frac{E_z}{E_r} = \frac{\upsilon_{\theta r}}{\upsilon_{r\theta}} = \frac{\upsilon_{zr}}{\upsilon_{rz}} = \gamma \quad (1)$$

На данном этапе учитывались только термоупругие деформации. Пусть C — матрица упругих модулей, которая является обратной к матрице податливости. Тогда, обобщенный закон Гука имеет вид:

$$\sigma = C \cdot \varepsilon^{el} \tag{2}$$

где ε^{el} — упругая часть деформации. Она выражается через полную деформацию таким образом:

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \alpha \Delta T \tag{3}$$

Из уравнения равновесия [4] и закона Гука для случая обобщенной плоской цилиндрически симметричной деформации в данной работе был получен общий вид зависимости радиального перемещения от радиуса при постоянных свойствах:

$$u_r(r) = C_1 r^{\sqrt{\gamma}} + C_2 r^{-\sqrt{\gamma}} + r\alpha\Delta T + r\frac{B\upsilon\sqrt{\gamma}}{(1+\sqrt{\gamma})(\upsilon-1)} \tag{4}$$

где α — коэффициент температурного расширения, ΔT — изменение температуры, γ определено выше; C_1, C_2, B — неизвестные коэффициенты.

Для реальной топливной таблетки свойства и температура зависят от радиуса, поэтому при решении она разбивается на концентрические кольцевые слои, в каждом из которых свойства и тепловое расширение считается постоянным. Это позволяет использовать общий вид решения (4). Для нахождения коэффициентов служат условия сшивки по перемещениям и радиальным напряжениям, а также аксиальные и радиальные граничные условия. В качестве последних, как правило, задаются давления внутри и снаружи таблетки, а также аксиальная сила. В итоге получается система линейных алгебраических уравнений, которая в данной работе для демонстрации метода численно решалась на языке Python.

Представленная модель была верифицирована на расчетах по свободному конечно-элементному коду «CalculiX». На рис. 1 представлено сравнение результатов расчетов по нашей модели и по методу конечных элементов.

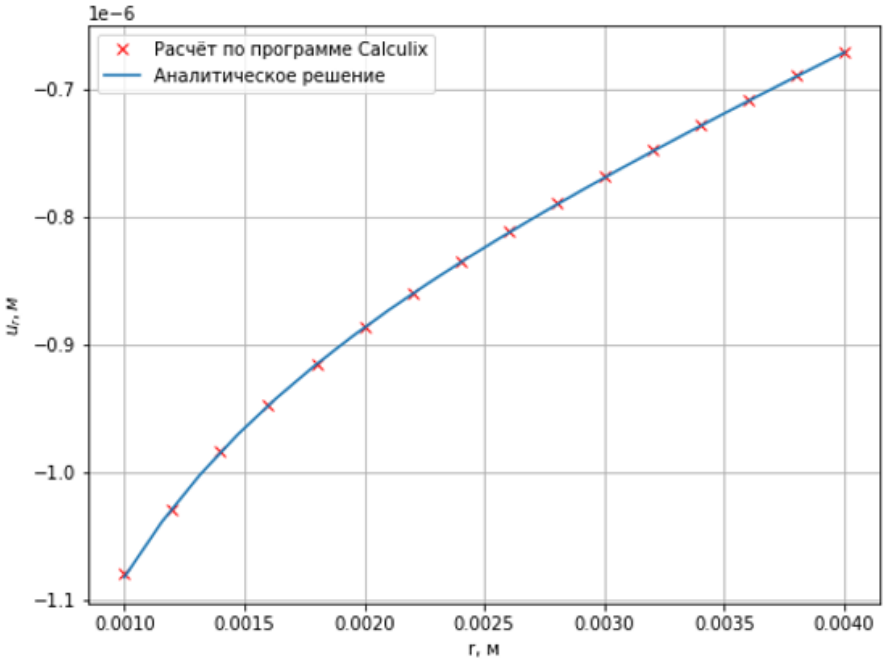


Рис. 1. График зависимости радиального перемещения u_r от радиуса r

Планируется подбор параметра эффективной анизотропии γ путем сопоставления решения по модели и конечно-элементных расчетов для таблеток с трещинами в реальной трехмерной геометрии.

Литература

1. *Крупкин А. В.* [и др.]. Обзор подходов к анализу ТВЭЛов ВВЭР с технологическими дефектами топливных таблеток // ВАНТ. Серия: Материаловедение и новые материалы. 2023. В. 4(120). С. 161–176.
2. *Сорокин А. А.* [и др.]. Разработка программных средств для моделирования термомеханического поведения ядерного топлива в реакторах на быстрых нейтронах // Матем. Моделирование. 2013. Т. 25. № 4. С. 29–43.
3. *Bower A. F.* Applied Mechanics of Solids. — CRC Press, 2009.
4. *Гудьер Дж., Тимошенко С. П.* Теория упругости. — М.: Наука, 1979.

УДК 621.039.68

Оценка образования водорода при аварии с двусторонним разрывом контура охлаждения дивертора на установке ИТЭР

***Н. Д. Гембицкий*[1,2], *К. С. Долганов*[1], *А. Д. Васильев*[1], *В. Н. Семенов*[1]**

[1]Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В рамках НИР «Развитие законодательной и нормативной базы в области использования атомной энергии, включая новые типы ядерных установок, термоядерные и гибридные системы» федерального проекта «Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий» комплексной программы Российской Федерации «Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии» в ИБРАЭ РАН выполняются работы по созданию интегральной программы для ЭВМ (кода), предназначенной для анализа водородной взрывобезопасности отечественных проектов термоядерных установок типа токамак [1–3]. В качестве референтного объекта используется проект ИТЭР. При разработке интегрального кода используется опыт создания физических моделей процессов, возникающих при тяжелых авариях на АЭС с ВВЭР. Поэтому для предварительных расчетов представительных аварий на ИТЭР используется код СОКРАТ [4].

Согласно расчетным исследованиям водородной взрывобезопасности ИТЭР [5, 6], в ходе аварии с потерей теплоносителя (LOCA) из контура охлаждения дивертора или первой стенки возможно образование взрывоопасной смеси водорода и воздуха в объеме вакуумной камеры и барботажного бака.

С целью анализа процессов в этих авариях и оценки массы образующегося водорода разработана расчетная модель установки ИТЭР для кода СОКРАТ. Нодализационная схема ИТЭР создана на основе опубликованных данных, которые использовались в расчетах аварий LOCA для ранних проектов ИТЭР по кодам ATHENA, MELCOR и RELAP5 [7–9].

С использованием этой модели выполнены расчеты аварии с двусторонним разрывом контура охлаждения дивертора. Феноменология аварии включает теплогидравлические процессы в различных элементах и помещениях термоядерной установки, конвективный и излучательный теплообмен, окисление паром материалов кассет дивертора или слоя бериллиевой пыли, выделение водорода при окислении, приток воздуха в вакуумную камеру (ВК) через разрыв.

Кассеты дивертора расположены в нижней части ВК токамака. На рис. 1 представлена цилиндрическая модель многослойной структуры нижней части внешней вертикальной мишени дивертора для расчета двумерной теплопроводности при помощи кода СОКРАТ. При работе токамака максимальный стационарный тепловой поток из плазмы (HHF = 8.8 МВт/м^2) приходится на область нижней части мишеней дивертора (ячейка №4), поверхность которой в раннем проекте ИТЭР выполнена из углеволоконного композита CFC.

В сценарии рассматриваемой аварии с 3,2 с до 4,2 с предполагается срыв плазмы, в результате которого плотность теплового потока на мишень дивертора (ячейки № 3 и № 4 на рис. 1) возрастает до 20 МВт/м^2. После 4,2 с тепловой поток на поверхность дивертора постулируется равным нулю. Срыв плазмы приводит к росту температур в верхней части мишени (рис. 2). После прекращения теплового потока от плазмы наблюдается охлаждение ячейки № 3. Температура ячейки № 4 увеличивается вследствие экзотермической реакции окисления паром бериллиевой пыли на ее поверхности. При температуре стенки свыше 3000 К в расчете возникают значительные неопределенности, связанные с возможным плавлением охлаждающих трубок. Для этих температур отсутствуют надежные данные по свойствам материалов. Поэтому процесс плавления в расчете не моделировался, и моделируемая авария ограничена временем достижения температуры 3300 К.

В расчетах показано, что процесс окисления W — материала поверхности верхней части вертикальных мишеней и купола дивертора — вносит пренебрежимо малый вклад в образование водорода из-за низкой температуры всей вольфрамовой стенки.

Также в расчетах оценена масса водорода, выделяющегося при окислении слоя пыли Be толщиной 2 мм, с использованием данных [10, 11]. С учетом экзотермической реакции окисления и нелинейной зависимости скорости окисления Be от температуры выделяется водород массой 5,8 кг, что соответствует полному окислению пыли в пределах области с максимальным потоком от плазмы. Вклад от окисления пыли на поверхностях за пределами этой области пренебрежимо мал из-за низкой температуры.

Также в работе выполнен расчетный анализ окисления нижней части вертикальных мишеней. Линейная кинетика окисления CFC [13] способствует ускоряющемуся разогреву в области ячейки № 4 моделируемой мишени. К моменту достижения температуры 3300 К вырабатывается около 1,2 кг водорода.

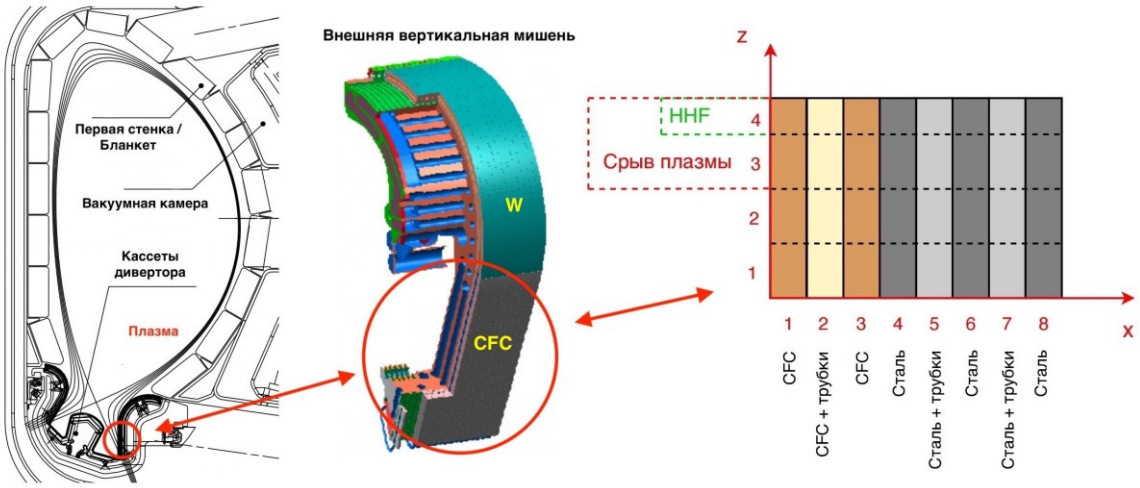


Рис. 1. Схема теплового элемента, описывающего многослойную структуру нижней части внешней вертикальной мишени дивертора в модели токамака ИТЭР [12]

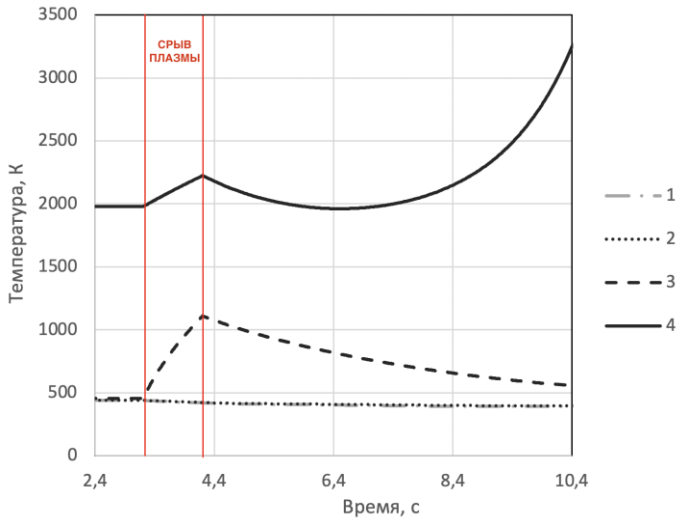


Рис. 2. Температура поверхности нижней части внешней вертикальной мишени дивертора на четырех высотных уровнях

Таким образом, разработанная для СОКРАТ модель ИТЭР позволяет моделировать аварии с окислением обращенных к плазме элементов токамака. Результаты расчета демонстрируют, что наибольший вклад в образование водорода вносит окисление Be пыли, расположенной в области высокого теплового потока от плазмы на кассеты дивертора, чуть меньшая масса водорода образуется при окислении CFC. Полученная масса водорода соизмерима с консервативной оценкой 20 кг, при которой возможна детонация [5].

Литература

1. *Васильев А. Д.* [и др.]. Инженерная модель окисления слоя бериллиевой пыли в условиях аварии с истечением теплоносителя из системы охлаждения в вакуумную камеру ИТЭР // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2022. Т. 45. № 2. С. 37–49.
2. *Ахмедов И. С.* [и др.]. Анализ аварии с потерей вакуума на ИТЭР с использованием интегральной программы для ЭВМ СОКРАТ-В1/В2 // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2023. Т. 46. № 2. С. 38–52.
3. *Васильев А. Д.* [и др.]. Возможность стратификации водорода в условиях аварии с истечением теплоносителя из системы охлаждения в вакуумную камеру токамака // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2023. Т. 46. № 2. С. 72–86.
4. *Bolshov L. A.* [et al.]. Results of SOCRAT code development, validation and applications for NPP safety assessment under severe accidents // Nucl. Eng. Des. 2019. V. 341. P. 326–345.
5. *Chuyanov V., Topilski L.* Prevention of hydrogen and dust explosion in ITER // Fusion Eng. Des. 2006. V. 81(8–14). P. 1313–1319.
6. *Redlinger R.* [et al.]. 3D-analysis of an ITER accident scenario // Fusion Eng. Des. 2005. V. 75–79. P. 1233–1236.

7. *Eriksson J.* [et al.]. ATHENA Calculation Model for the ITER-FEAT Divertor Cooling System. Final report with updates. — Nyköping: Studsvik Eco and Safety AB, 2001.
8. *ChunHong S.* MELCOR Analyses of Divertor Ex-vessel LOCA During Normal Operation. Contract EFDA 01/599, Deliverable 3 — Final Report. — Nyköping: Studsvik Eco and Safety AB, 2002.
9. *Popov E.* [et al.]. RELAP5 model of the divertor primary heat transfer system. — Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory, 2010.
10. *Merrill B. J.* [et al.]. A preliminary assessment of beryllium dust oxidation during a wet bypass accident in a fusion reactor // Fusion Eng. Des. 2009. V. 84(7–11). P. 1285–1288.
11. *Moore R. L.* Final Report on ITER Task Agreement 81-08. — Idaho Falls: Idaho National Laboratory, 2008.
12. ITER technical basis. — Vienna: International Atomic Energy Agency, 2002.
13. *J.R. García-Cascales* [et al.]. Characterisation of metal combustion with DUST code // Fusion Eng. Des. 2015. V. 98–99. P. 2142–2146.

Секция электродинамики сложных систем и нанофотоники

Председатель: А. Н. Лагарьков (д. ф.-м. н., академик РАН)

Зам. председателя: А. П. Виноградов (д. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: В. И. Полозов

Дата: 03.04.2024 Время: 10:00

УДК 535.016, 535-92, 535.14

Управляемое осаждение биологических аналитов на примере альбумина и миоглобина с помощью физических методов для проведения качественного и количественного ГКР-анализа

***А. Р. Нигматулин*[1,2], *И. А. Богинская*[2], *К. А. Верещагин*[2,4], *К. Н. Афанасьев*[2], *М. В. Седова*[2], *И. А. Рыжиков*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ИТПЭ РАН
[3]НОЦ ФМН — МГТУ им. Н. Э. Баумана
[4]ИОФ РАН

Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) в настоящее время активно используется для детектирования органических веществ. Важной проблемой для исследований все еще является низкая чувствительность метода для малых концентраций высокомолекулярных аналитов типа белков. На подобных концентрациях при высушивании раствора на поверхности ГКР подложки происходит хаотичное распределение белка по поверхности, а также наблюдается кофе-ринг эффект (КРЭ) [1], что приводит к невоспроизводимым и низкоинтенсивным ГКР спектрам. В данной работе мы рассмотрели метод пробоподготовки растворов белков на примере человеческого сывороточного альбумина (ЧСА) и миоглобина человека (МГЧ) с помощью импульсного лазера с длинами волн 1570 нм и 785 нм для улучшения распределения высушенного осадка на ГКР активных подложках. Ранее подобный метод с целью уничтожения КРЭ и компактного высушивания раствора $CaSO_4$ был использован в работе [2]: сфокусированный в центре капли раствора луч лазера 1570 нм, предположительно, способствует перенаправлению потока Марангони к центру капли, таким образом собирая молекулы аналита в одно пятно осадка, что повышает вероятность формирования однородного и компактного сухого осадка аналита и должно обеспечить большее количество вещества в фокальной области объектива спектрометра и, следовательно, более высокоамплитудные ГКР спектры. Одновременно лазер с длиной волны 785 нм на серебряной поверхности создает в неоднородностях морфологии значительное усиление поля ($\sim E^4$) [3]. Предположительно, места локализации поля способствуют созданию критической концентрации раствора для формирования зародыша кристалла аналита в выгодных для ГКР спектроскопии областях ГКР подложки.

В результате проведенных экспериментов по высушиванию растворов белков различных концентраций под лазером 1570 нм удалось получить значительное повышение чувствительности ГКР (рис. 1) для малых концентраций 10^{-2} мкг/мл по сравнению с высушиванием без лазера для капель растворов ЧСА, а размеров осадков был постоянный без КРЭ.

Для капель, высушенных под лазером 785 нм, были получены воспроизводимые ГКР спектры при малых концентрациях, тогда как в контроле (капли тех же концентраций, высушенные без лазера) воспроизводимость и стабильность ГКР спектров не наблюдалась. А также наблюдали частичное сохранение КРЭ, а зависимость размеров капель от концентрации была нелинейной. При высушивании растворов белков на стекле без воздействия лазера была обнаружена линейна зависимость в логарифмических координатах размера осадка от концентрации белка, позволившая получить калибровочные кривые, для контроля концентрации белка в исходном растворе.

Реализованный вышеописанным образом метод пробоподготовки с использованием импульсных лазеров на длинах волн 1570 нм и 785 нм позволяет количественно и качественно определять состав раствора. Эти результаты могут иметь важное практическое применение в биоаналитике и спектроскопии.

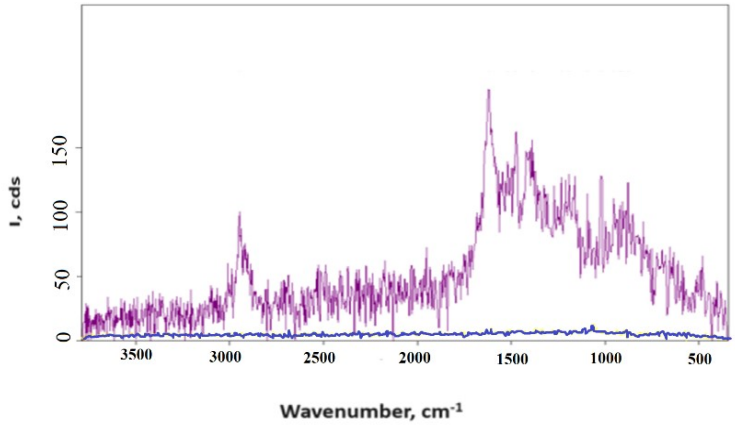


Рис. 1 Фиолетовым показан ГКР спектр ЧСА 10^{-2} мкг/мл из высушенных под лазером 1570 нм капель. Желтым показан спектр капель, высушенных без лазера

Литература

1. *Devineau S.* [et al.]. Protein Adsorption and Reorganisation on Nanoparticles Probed by the Coffee-Ring Effect: Application to Single Point Mutation Detection // Journal of the American Chemical Society. 2016. V. 138(36). P. 11623–11632.
2. *Li D.* [et al.]. Beating Coffee-Ring Deposition for Droplet Evaporative Crystallization // Analytical Chemistry. 2021. V. 93(25). P. 8817–8825.
3. *Le Ru E., Etchegoin P.* Rigorous justification of the $|E|^4$ enhancement factor in Surface Enhanced Raman Spectroscopy // Chemical Physics Letters. 2006. V. 423(1-3). P. 63-66.

УДК 535.3

Жесткий режим генерации в системе с оптомеханической неустойчивостью

***А. Мухамедянов*[1], *А. А. Зябловский*[1,2,3], *Е. С. Андрианов*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
[3]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

В настоящее время оптомеханические системы представляют огромный интерес для создания когерентных источников излучения, сенсоров, лазерных интерферометров и т. д. Мы рассмотрели оптомеханическую систему, состоящую из двух оптических мод, которые взаимодействуют с модой механических колебаний (фононами) [1]. В нашей работе предсказано существование жесткого режима возбуждения лазерной генерации в оптомеханической системе и получено аналитическое выражение для порога генерации [2]. Продемонстрированно, что жесткий режим возбуждения возникает из-за существования дополнительного фазового условия для второй оптической моды и механической моды. Для рассматриваемой оптомеханической системы получена аналитическая зависимость для интенсивности второй оптической моды $|a_2|^2$, которая совпадает с результатами, полученными при численном моделировании уравнений, описывающих систему.

Стоит отметить, что аналитическое решение предсказывает корневую зависимость интенсивности $|a_2|^2$от амплитуды внешней волны накачки $|\Omega|$ и при выполнении фазового условия в оптомеханической системе удается добиться скачкообразного изменения интенсивности $|a_2|^2$ (рис. 1*а*).

В нашей работе показано, что рассматриваемая система, в которой реализуется жесткий режим возбуждения, может быть использована для создания высокочувствительного сенсора, работающего по методу внутрирезонаторной лазерной спектроскопии. В данном методе величина скачка определяет чувствительность сенсора (рис. 1*б*). Численное моделирование показывает, что даже при наличии шума резкий

скачок интенсивности сохраняется (рис. 1). Таким образом, шум не приводит к исчезновению жесткого режима возбуждения лазерной генерации, что позволяет создать высокочувствительный сенсор.

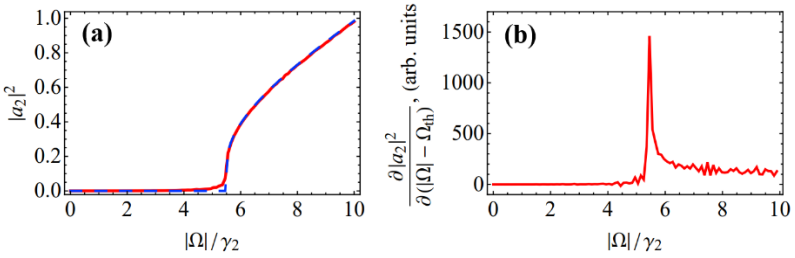


Рис. 1. Зависимость интенсивности $|a_2|^2$от амплитуды внешней волны $|\Omega|$ (*а*), зависимость $\frac{\partial|a_2|^2}{\partial(|\Omega|-\Omega_{th})}$ от амплитуды внешней электромагнитной волны $|\Omega|$ (*б*). Рисунок взят из работы [2]

Литература

1. *Grudinin I. S.* [et al.]. Phonon laser action in a tunable two-level system // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104(8): 083901.
2. *Mukhamedyanov A., Zyablovsky A. A., Andrianov E. S.* Hard excitation mode of a system with optomechanical instability // Opt. Lett. 2024. V. 49(4). P. 782–785.

УДК 621.37

Метод измерения диэлектрической проницаемости с использованием программного обеспечения встроенных вычислительных систем

А. П. Седов, В. Д. Бурцев, Н. М. Назаров, Д. С. Филонов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На текущий момент существует несколько способов измерения диэлектрической проницаемости, такие как метод Николсона–Росса–Вейра [1], метод «горячей пробы» [2], метод свободного пространства [3], а также метод временной диэлектрической спектроскопии [4]. Стоит отметить, что, хотя все эти методы хорошо изучены и воспроизводимы на лабораторном оборудовании, ни один из них не является достаточно простым и компактным для того, чтобы использовать его в бытовых условиях, а некоторые к тому же являются инвазивными. Известен ряд задач, в которых быстрое измерение диэлектрической проницаемости объекта в реальном времени может значительно ускорить процесс: например, прием продуктов питания на склад, где внутренность упаковки сканируется и сравниваются с эталонными значениями, а при невхождении в доверительный интервал — отбраковывается. Похожими проблемами могут стать быстрое определение концентрации солей в неизвестных растворах для задач медицины или определение степени влажности древесины и керамики для производства. Для решения подобного рода задач непрофильными специалистами принцип измерений, как и устройство сканера, должны быть максимально упрощены.

В данной работе предложен компактный неинвазивный способ измерения диэлектрической проницаемости посредством встраиваемых систем. На рис. 1 представлена структурная схема. В основе решения лежит проведение серии измерений для нескольких частот из заранее заданного диапазона, где каждое измерение состоит из нескольких этапов. На первом этапе микроконтроллер ESP32 с АЦП (*б*) реализует запитку генераторов, управляемых напряжением (ГУН) (*в*, *г*). Затем сигналы генераторов отличаются по частоте: 1,17 ГГц и 1,19 ГГц. Далее величина сигналов с ГУН $\boldsymbol{U_0}$ измеряется микросхемой при помощи направленных ответвителей (–40 дБ, (*д*, *е*)) и частотного миксера (*н*) на промежуточную частоту 20 МГц. Затем основной сигнал через циркуляторы (*ж*, *з*) передается на антенну (*л*) с частичным излучением, а величина напряжения отраженной части $\boldsymbol{U_r}$ при помощи второй пары направленных ответвителей (*к*, *и*) и частотного миксера (*м*) измеряется микросхемой. Данные, после обработки микросхемой, поступают на телефон через кабель USB.

Для системы можно сформулировать эффективный коэффициент стоячей волны на промежуточной частоте 20 МГц, по аналогии с обыкновенным:

$$\text{КСВН}_{\text{эфф.}} = \left|\frac{\boldsymbol{U_r}+\boldsymbol{U_0}}{\boldsymbol{U_r}-\boldsymbol{U_0}}\right| \quad (1)$$

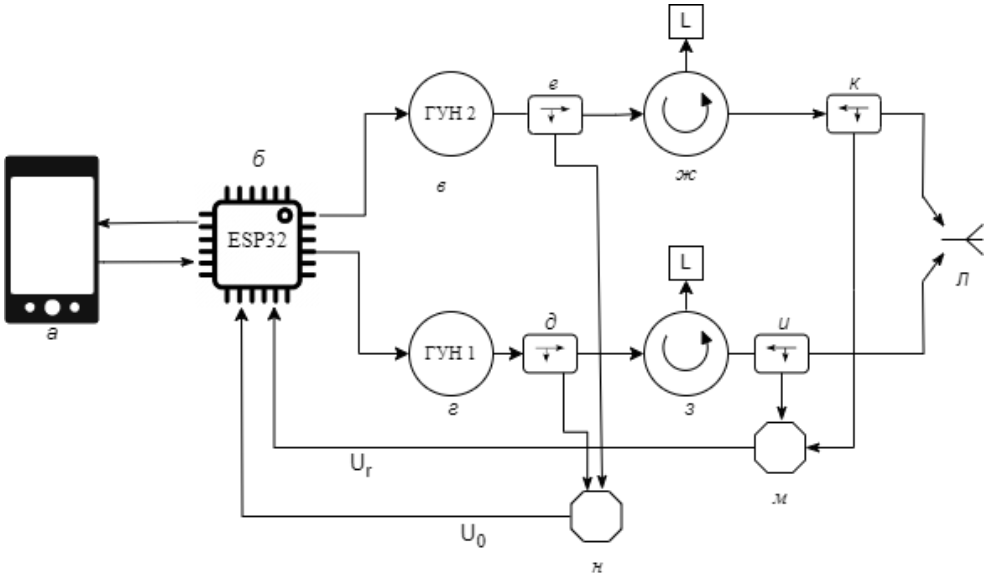


Рис. 1. Структурная схема реализации предложенного метода, где: *а* — мобильный телефон; *б* — микроконтроллер ESP32 с АЦП; *в*, *г* — ГУН; *д*, *е* — Первая пара направленных ответвителей; *н*, *м* — смесители частот; *ж*, *з* — *Y*-циркуляторы; *л* — IFA-антенна; *к*, *и* — вторая пара направленных ответвителей

При внесении в ближнее поле антенны диэлектрика амплитуда $\boldsymbol{U_r}$ изменяется. Следовательно, в процессе калибровки возможно построить взаимно однозначное соответствие $КСВН_{эфф.}$ от величины диэлектрической проницаемости измеряемого объекта.

При помощи метода конечных разностей во временной области программного пакета CST Studio Suite был проведен численный эксперимент для IFA-антенны (рис. 2*а*), согласованную на выбранных частотах (рис. 2*б*). В качестве измеряемого образца был выбран диэлектрический куб с заданными проницаемостью и потерями, находящийся на фиксированном расстоянии от антенны (рис. 2*а*). Результаты реализации описанного выше алгоритма приведены на рис. 2*в*.

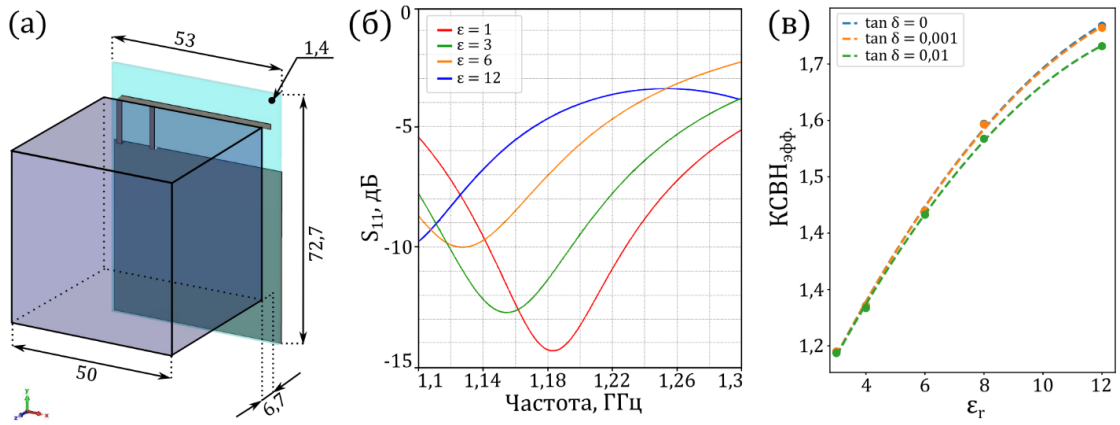


Рис. 2. Численный эксперимент: *а* — общая геометрия системы, все размеры указаны в мм; *б* — коэффициент отражения IFA-антенны с различными уровнями $\boldsymbol{\epsilon}$; *в* — зависимость отклика детектора от диэлектрической проницаемости образца по предложенному методу

На графике зависимости (рис. 2*в*) $КСВН_{эфф.}(\boldsymbol{\varepsilon_r})$ изображены точки и соответствующие им линии тренда для случаев без потерь (голубой), $\boldsymbol{tan\,\delta = 0.001}$ (оранжевый) и $\boldsymbol{tan\,\delta = 0.01}$ (зеленый). Представленные соответствия биективны, следовательно, при фиксации одного из параметров ($\boldsymbol{\varepsilon_r}$ или $\boldsymbol{tan\,\delta}$) возможно достоверно различить диэлектрические объекты с различными проницаемостями и таким образом решить задачу быстрого измерения диэлектрической проницаемости.

В перспективе данная схема будет выполнена в реальном эксперименте, будет оценен вклад в погрешность измерения диэлектрической проницаемости от неравномерности поверхности измеряемого объекта, а также его формы и размеров.

Данная работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по проекту №075-11-2022-011.

Литература

1. *Abbas Z., Pollard R. D., Kelsall R. W.* A rectangular dielectric waveguide technique for determination of permittivity of materials at W-band // IEEE Trans. Microw. Theory Tech. 1998. V. 46. P. 2011–2015. DOI: 10.1109/22.739275.
2. *Jilani M. T.* [et al.]. A Brief Review of Measuring Techniques for Characterization of Dielectric Materials // ITEE Journal. 2014. V. 1. P. 2–4.
3. *Ghodgaonkar D. K., Varadan V. V., Varadan V. K.* A free-space method for measurement of dielectric constants and loss tangents at microwave frequencies // IEEE Trans. Instrum. Meas. 1989. V. 38. P. 789–793. DOI: 10.1109/19.32194.
4. *Polevaya Y.* [el al.]. Time domain dielectric spectroscopy study of human cells: II. Normal and malignant white blood cells // Biochim. Biophys. Acta. 1999. V. 1419(2). P. 257–271. DOI: 10.1016/s0005-2736(99)00072-3.

УДК 537.876

Уменьшение неравномерности поля сформированного плоской линзой

***Д. П. Королев*[1,2], *В. С. Солосин*[2], *Н. Л. Меньших*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

Обобщенная линза Микаэляна [1] — это плоская линза, преломление в которой достигается за счет меняющегося от центра к краю показателя преломления. Такая линза может быть эффективно использована в качестве коллиматорной линзы в рупорной камере [2]. На основе линзы Микаэляна разрабатываются линзовые антенны [3] для 5G технологий. В работе [4] была предложена модель плоской линзы для рупорной безэховой камеры, которая была изготовлена с помощью 3D-печати. Результаты численных и натурных экспериментов показали, что линза обеспечивает неравномерность распределения фазы поля в рабочей зоне не более $\pi/8$ и может быть использована в качестве коллимирующего устройства. В данной работе исследуется возможность уменьшения неравномерности распределения амплитуды и фазы поля, сформированного плоской линзой.

Известно, что основной причиной, вызывающей искажение поля после линзы в СВЧ диапазоне, является дифракция на ее краях [5]. Для снижения влияния этого эффекта на распределение поля предлагается установить линзу в кольцо из материала с диэлектрической проницаемостью равной по величине диэлектрической проницаемости на краю линзы. Одновременно кольцо может служить опорой для линзы в рупорной камере. Рассматриваются два варианта исполнения кольца: кольцо из однородного диэлектрика и кольцо из диэлектрика на основе ячеистой структуры, аналогичной структуре линзы. На рис. 1 представлены соответствующие модели, выполненные в масштабе 1:22. Радиус линзы составляет 100 мм, внешний радиус кольца 175 мм. На этом расстоянии поле в макете рупорной камере спадает на 10 дБ от максимального значения.

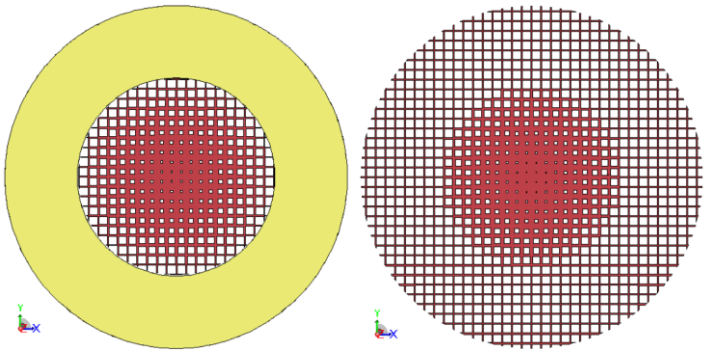
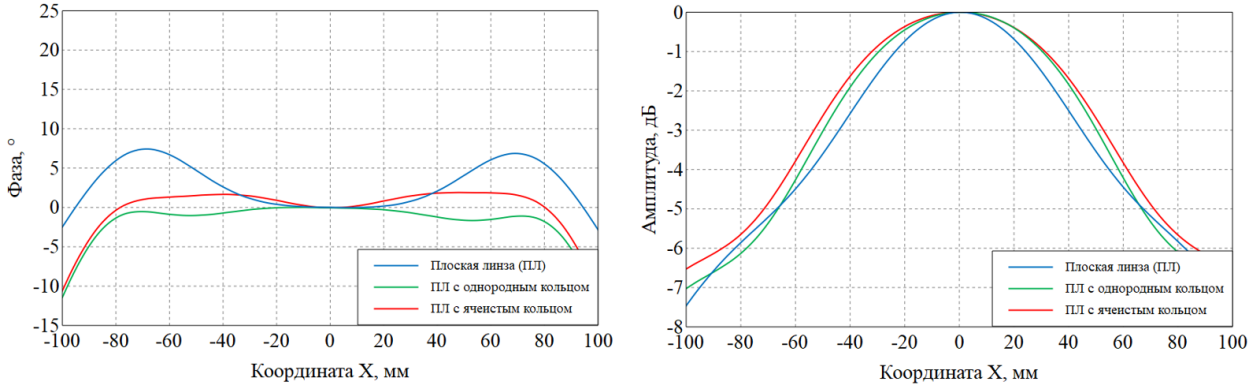


Рис. 1. Плоские линзы в кольце однородного диэлектрика: *слева* — плоская линза с однородным кольцом, *справа* — плоская линза с ячеистым кольцом

Расчеты распределения полей после линзы выполнены методом интегральных уравнений в программном пакете для электродинамического моделирования Altair FEKO. В качестве излучателя использовался точечный источник с диаграммой направленности, имитирующей распределение поля в рупорной камере. Источник устанавливался строго в фокусе линзы, т. е. располагался на расстоянии 800 мм от нее. Материал, из которого печаталась данная линза (PLA пластик), в расчетах рассматривался как однородный диэлектрик с частотно независимой диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 2{,}53$.

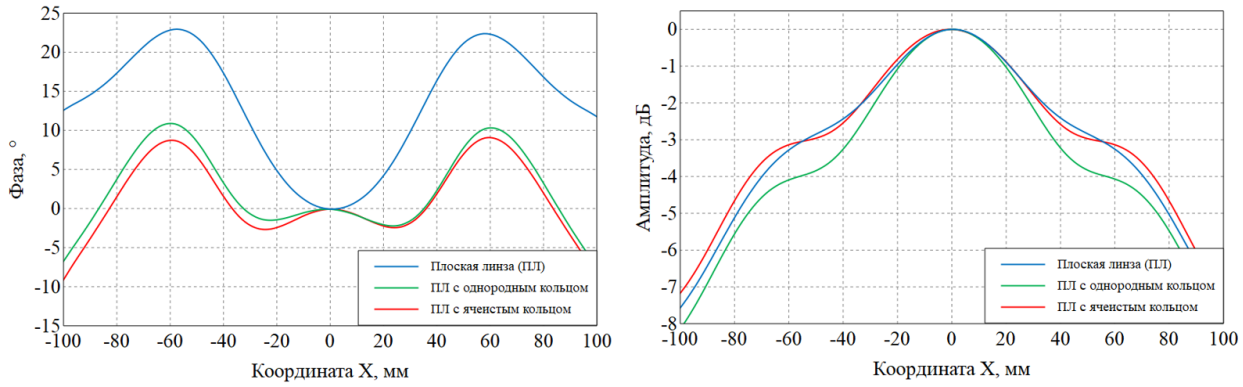
Результаты расчетов на частоте 8 ГГц в Н-плоскости на расстоянии 300 мм от линзы представлены на рис. 2. Как и в работе [2], примем поперечный размер рабочей зоны линзового коллиматора как ¾ диаметра линзы, то есть от –75 до 75 мм. Для плоской линзы неравномерность фазы поля в рабочей зоне составила более 7°, линзы с однородным и ячеистым кольцами позволяют уменьшить ее до 2°. На графике 2*б* видно, что для плоской линзы и ячеистого кольца неравномерность амплитуды составила около 5,5 дБ, тогда как для плоской линзы с однородным кольцом неравномерность достигает почти 6 дБ.



а *б*

Рис. 2. Распределение фазы (*а*) и амплитуды (*б*) на расстоянии 300 мм за линзой на частоты 8 ГГц

На рис. 3 представлены графики распределения амплитуды и фазы поля на частоте 10 ГГц. Для плоской линзы неравномерность фазы поля составила 23°, а плоские линзы с однородным и ячеистым кольцами позволяют уменьшить неравномерность фазы до 13°. Неравномерность распределения амплитуды поля в рабочей зоне составила около 4,5 дБ для плоской линзы, 5 дБ для плоской линзы с однородным кольцом и около 4 дБ для плоской линзы с ячеистым кольцом.



а *б*

Рис. 3. Распределение фазы (*а*) и амплитуды (*б*) на расстоянии 300 мм за линзой на частоты 10 ГГц

Предложенные варианты линзы с кольцами с постоянной диэлектрической проницаемостью позволяют снизить влияние дифракционных эффектов и уменьшить неравномерность распределения амплитуды и фазы поля после линзы, причем вариант с ячеистой структурой обеспечивает меньшую неравномерность распределения поля.

Литература

1. *Зелкин Е. А., Петрова Р. А.* Линзовые антенны. — М.: Советское радио, 1974. С. 135–137.
2. *Balabukha N. P., Menshikh N. L., Solosin V. S.* Development of a Plane Lens for a Tapered Anechoic Chamber // Proceedings — 2022 IEEE 8th All-Russian Microwave Conference. P. 187–190.
3. *Chen M.* [et al.] Ray-Tracing and Physical-Optics Model for Planar Mikaelian Lens Antennas // IEEE Trans. Antennas Propag. 2024. V. 72(2). P. 1735–1744.
4. *Королев Д. П.* [и др.] Модель плоской линзы // Сборник тезисов двадцать четвертой ежегодной научной конференции ИТПЭ РАН. — М.: ИТПЭ РАН, 2023. С. 48–49.
5. *Балабуха Н. П., Зубов А. С., Солосин В. С.* Компактные полигоны для измерения характеристик рассеяния объектов — М.: Наука, 2007. С. 41–44.

УДК 535.015

Переход от неоднородного к однородному уширению ниже порога генерации

***И. С. Пашкевич*[1], *И. В. Доронин*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Духова
[3]Институт спектроскопии РАН

Ширина спектра излучения активной среды оказывает существенное влияние на поведение лазера. Ширина линии определяется сочетанием двух типов уширения: однородного и неоднородного. Однородное уширение возникает, когда частоты перехода всех частиц активной среды совпадают, неоднородное, — когда частоты перехода различаются. В данной работе исследовано поведение формы и ширины спектра одномодового лазера с доминирующим неоднородным уширением при изменении скорости накачки.

Свойства лазера исследовались с помощью уравнений [1, 2]:

$$\frac{da}{dt} = (-\gamma_a - i\omega_a)a - i\Omega \sum_{j=1}^{N} \sigma_j, \tag{1}$$

$$\frac{d\sigma_j}{dt} = (-\gamma_\sigma - i\omega_\sigma^{(j)})\sigma_j + i\Omega a D_j, \tag{2}$$

$$\frac{dD_j}{dt} = (\gamma_P - \gamma_D) + (\gamma_P + \gamma_D)D_j + 2i\Omega\left(a\sigma_j^* + a^*\sigma_j\right), \tag{3}$$

где a — амплитуда ЭМ поля в резонаторе, σ_j и D_j — поляризация и инверсия населенностей j-й частицы активной среды. Ω — константа связи между полем резонатора и каждой частицей. γ_a — скорость релаксации ЭМ поля, γ_D– скорость продольной релаксации атомов, γ_P — скорость накачки активной среды. γ_σ — скорость поперечной релаксации атомов, которая определяет однородное уширение. $\omega_\sigma^{(j)}$ — частоты перехода активных частиц, они имеют нормальное распределение.

С помощью линейного анализа уравнений (1)–(3) при различных значениях скорости накачки γ_D показано, что существует критическое значение скорости накачки, при которой формируется особая мода, состоящая из коллективных колебаний электромагнитного поля и активных частиц с различными частотами перехода. При превышении критической скорости накачки в спектре лазера доминирует особая мода, таким образом, неоднородное уширение, имеющее Гауссову форму, эффективно заменяется однородным, которое имеет форму Лоренца. Данный переход происходит при скорости накачки ниже порога генерации.

Также обнаружено, что неоднородное уширение влияет на порог генерации и частоту генерации аналогично однородному уширению. Однако порог генерации для неоднородно уширенной активной среды несколько ниже, чем для однородно уширенной. Этот результат важен для проектирования низкопороговых лазеров, поскольку неоднородное уширение может привести к более низкой пороговой скорости накачки.

Литература

1. *Scully M. O., Zubairy M. S*. Quantum optics. — Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
2. *Siegman A. E*. Lasers. — Sausalito: University Science Books, 1986.

УДК 535.14 621.373.826

Модель открытой квантовой системы для описания эрбиевого лазера с учетом парного взаимодействия атомов эрбия

***И. В. Вовченко*[1,4], *Е. С. Андрианов*[1,2,3], *А. В. Дорофеенко*[1,2,3,4], *А. М. Смирнов*[1,4], *О. В. Бутов*[1,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[3]ВНИИА им. Н. Л. Духова
[4]Институт радиотехники и электроники им. Котельникова РАН

В современных технологических реализациях систем для передачи информации, оказания медицинской помощи, спектроскопии большое применение находят волоконные лазерные системы [1].

Волоконный лазер представляет из себя оптоволокно, сердцевина которого допирована атомами активной среды. Использование атомов эрбия в качестве активной среды является одним из возможных вариантов для реализации такой системы [1, 2].

Волоконные эрбиевые лазеры хорошо зарекомендовали себя, так как позволяют проводить накачку на разных частотах и получать большое усиление сигнала, при низком уровне шумов [3, 4]. Они находят применение в промышленности [1], медицине [5], связи [6] и научных отраслях [7].

В зависимости от параметров системы, волоконные лазеры, допированные атомами эрбия могут работать как в режиме генерации излучения с постоянной интенсивностью, так и в пичковом режиме генерации [1]. Теоретическое описание работы данного лазера, обычно, происходит при помощи скоростных уравнений [8]. Хотя такое описание действительно дает хорошее соответствие между теорией и экспериментом, многие важные нюансы динамики квантовой системы исключаются из рассмотрения. Таким образом, интересно построение модели волоконного лазера, допированного атомами эрбия, которая, исходя из первопринципов, могла бы описать и генерацию излучения с постоянной интенсивностью, и переход в пичковый режим генерации.

В рамках работы, была рассмотрена задача о лазерной моде, взаимодействующей с набором двухуровневых систем, часть из которых объединилась в пары. Было получено управляющее уравнение на матрицу плотности, описывающее динамику данной системы. Показано, что когда атомы эрбия практически не объединяются в пары, то порог генерации излучения сглаживается. Для случая, когда значительное число атомов эрбия объединяются в пары, показана возможность перехода данной системы в пичковый режим генерации. Построена бифуркационная диаграмма для интенсивности излучения.

Литература

1. *Shi W.* [et al.]. Fiber lasers and their applications // Applied optics. 2014. V. 53(28). P. 6554–6568.
2. *Dragic P. D., Cavillon M., Ballato J.* Materials for optical fiber lasers: A review // Applied Physics Reviews. 2018. V. 5(4): 041301.
3. *Naji A. W.* [et al.]. Review of Erbium-doped fiber amplifier // International Journal of the Physical Sciences. 2011. V. 6(20). P. 4674–4689.
4. *Bouzid B.* Analysis and review of Erbium doped fiber amplifier // 2013 Saudi International Electronics, Communications and Photonics Conference. 2013. P. 1–5.
5. *Koranda P.* [et al.]. Electro-optically Q-switched Er: YAG laser and its application // XV International Symposium on Gas Flow, Chemical Lasers, and High-Power Lasers. 2005. V. 5777. P. 384–389.
6. *Singh P. K.* [et al.]. Design of high power pump source of eye safe laser for geo-scientific application // Indian Journal of Pure and Applied Physics. 2005. V. 43(7). P. 517–521.
7. *Lesko D. M. B.* [et al.]. A six-octave optical frequency comb from a scalable few-cycle erbium fibre laser // Nature Photonics. 2021. V. 15(4). P. 281–286.
8. *Sanchez F.* [et al.]. Effects of ion pairs on the dynamics of erbium-doped fiber lasers // Physical Review A. 1993. V. 48(3): 2220.

УДК 51.73

Определение сердечного ангиотензинпревращающего фермента в крови на основе спектров ГКР с использованием методов машинного обучения

***Р. Р. Сафиуллин*[1,2], *И. А. Богинская*[1], *Н. Л. Нечаева*[3], *В. Е. Тихомирова*[4], *О. В. Крюкова*[4], *О. А. Кост*[4], *К. Н. Афанасьев*[1], *И. А. Рыжиков*[1,5], *Н. И. Булаева*[6], *Е. З. Голухова*[6]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН
[4]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[5]НОЦ ФМН — МГТУ им. Н. Э. Баумана
[6]Национальный медицинский исследовательский центр сердечно-сосудистой хирургии им. А. Н. Бакулева

В этой работе описаны итоги исследования, направленного на разработку и апробацию метода, который позволяет диагностировать повышенное содержание в крови сердечного ангиотензинпревращающего фермента (АПФ) — маркера, указывающего на риск сердечных заболеваний. В качестве примера применения метода рассмотрена фибрилляция предсердий, что делает его особенно важным для выявления кардиальных рисков. Метод основан на анализе спектров гигантского комбинационного рассеяния

(ГКР) сыворотки крови с использованием методов машинного обучения, в том числе логистической регрессии (ЛР) и анализа главных компонент (PCA), позволяющих осуществлять не только эффективную классификацию спектров, но и идентификацию полос колебаний, характерных для сердечного АПФ на фоне общего ГКР спектра сыворотки крови. Новым подходом при разработке метода является физико-химическая интерпретация коэффициентов, позволяющая провести корреляцию с полосами колебаний ГКР спектров, что открывает новые возможности для точной диагностики заболеваний спектра кардиальных рисков.

Экспериментальный этап исследования включал сбор и подготовку образцов сыворотки крови, их анализ и последующую математическую обработку полученных данных. В работе уделено особое внимание методологии обработки и анализа спектральных данных. Она включала в себя предварительную обработку данных, уменьшение их размерности с помощью PCA и оценку эффективности классификации с использованием ЛР. На рис. 1 приведены результаты расчетов, показывающие разделяющую плоскость, построенную моделью в осях главных компонент.

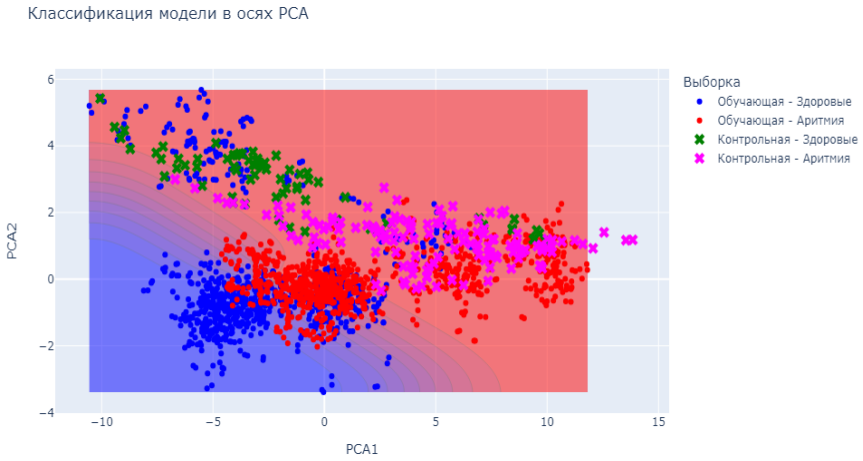


Рис. 1. Классификация модели в осях PCA

Из рис. 1 видно, что модель позволяет отделить спектры разных групп друг от друга с чувствительностью на отложенной выборке 93 %.

Таким образом, оценка модели на данных, полученных от различных пациентов, подтвердила высокую эффективность предложенного подхода для поиска различий в спектрах, соответствующих как пациентам с фибрилляцией предсердий, так и здоровым донорам.

Литература

1. *Boginskaya I.* [et al.]. Human Angiotensin I-Converting Enzyme Produced by Different Cells: Classification of the SERS Spectra with Linear Discriminant Analysis // Biomedicines. 2022. V. 10(6): 1389.
2. *Liu Y.* [et al.]. Rapid simultaneous SERS detection of dual myocardial biomarkers on single-track finger-pump microfluidic chip // Analytica Chimica Acta. 2023. V. 1239: 340673.

УДК 538.911

Разработка термостойкого просветляющего покрытия кремниевого ИК-прозрачного окна в диапазоне 3–5 мкм для микроболометров

***С. А. Баженова*[1,2], *В. И. Полозов*[1], *А. С. Набоко*[1], *К. Н. Афанасьев*[1], *И. В. Быков*[1], *И. А. Рыжиков*[1], *А. М. Мерзликин*[1]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва, Россия
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), физтех-школа физики и исследований им. Ландау, Москва, Россия

Детекторы на основе ИК-матриц находят применение во многих направлениях диагностики патологий человека, так как чувствительны к небольшим локальным изменениям температуры. Несмотря на то, что пик излучения человеческого тела находится примерно на 10 мкм, в диапазоне 3–5 мкм

достигается большее разрешение термографического изображения. Оптически прозрачные окна применяются как элемент корпуса, сохраняющего под вакуумом чувствительную матрицу для детектирования ИК-излучения.

Собственное пропускание кремния в диапазоне 3–5 мкм составляет примерно 55 %, что является недостаточным для применения в современной тепловизионной технике. Формирование просветляющего покрытия является основным приемом повышения пропускания ИК-прозрачного окна. Основными требованиями к просветляющему покрытию окна являются максимальный коэффициент прохождения, широкая полоса пропускания, хорошая адгезия к подложке, устойчивость к воздействию высоких температур. Задача данной работы заключалась в моделировании и получении просветляющего покрытия на монокристаллическом кремнии с максимумом пропускания не менее 90% на 4 мкм нормально падающего излучения.

Материал просветляющего покрытия должен быть близок к среднему геометрическому показателей преломления кремниевой подложки ($n_{Si} = 3{,}4$ в выбранном диапазоне) и воздуха ($n_{Air} = 1$). Оптическая толщина просветляющего слоя должна составлять четверть длины волны падающего излучения на пике пропускания. В качестве однослойного просветляющего покрытия был выбран ZnS ($n_{ZnS} = 2{,}3$). Моделирование и оптимизация просветляющего слоя производились при помощи программы «Essential Macleod». Расчетное значение пропускания получено 94,2 % на 4 мкм для слоя, нанесенного с обеих сторон кремниевой подложки. Слой был получен электронно-лучевым испарением в вакууме. Измерения спектра пропускания полученного окна выполнялись в диапазоне 1,5–25 мкм при помощи спектрофотометра с преобразованием Фурье. Было достигнуто пропускание окна 93,3 % на 3,92 мкм, ширина полосы пропускания по уровню 90 % составила 1,05 мкм. Устойчивость покрытия проверялась скотч-тестом до и после выдержки при температуре 250 °C (температура вакуумной пайки корпуса ИК-детектора). Полученный просветляющий слой толщиной 450 нм оказался напряженным, из-за чего произошла локальная деламинация покрытия при высокотемпературной обработке. Пропускание кремниевого окна уменьшилось до 90 % на 3,92 мкм. Скотч-тест привел к полному отслоению покрытия.

Для уменьшения внутренних напряжений было увеличено количество слоев просветляющего покрытия, в качестве дополнительного слоя был выбран SrF_2 ($n_{SrF_2} = 1{,}4$). В результате численного моделирования было разработано просветление, ширина полосы пропускания которого увеличилась до 4 мкм. В полосе пропускания получено два максимума: 99,7 % на 2,88 мкм и 98 % на 5,06 мкм. Двухслойное покрытие было получено последовательным осаждением на кремний слоев ZnS толщиной 430 нм и SrF_2 толщиной 660 нм. Пропускание кремниевого окна выросло до 99,8 % на 4,09 мкм, ширина полосы пропускания увеличилась до 3,05 мкм. После выскокотемпературной обработки структура просветляющего покрытия была нарушена, ширина полосы пропускания несущественно уменьшилась, максимум пропускания составил 95,5 % на 4,6 мкм. В результате скотч-теста не произошло полного отслоения покрытия, что свидетельствует о лучшей термостойкости двухслойного просветления.

Дальнейшая работа будет заключаться в уменьшении напряженности, увеличения адгезии к подложке, расширения полосы пропускания и увеличения максимума пропускания окна, что может быть достигнуто путем увеличения количества слоев просветляющего покрытия.

УДК 621.763, 535-15

Разработка метода микроструктурирования поверхности кремния для просветления кремниевых окон микроболометрических датчиков в дальнем ИК-диапазоне

Ф. М. Балаховский*, *В. И. Полозов*, *А. В. Дорофеенко*, *А. С. Набоко*, *К. Н. Афанасьев*, *И. В. Быков*, *И. А. Рыжиков*, *А. М. Мерзликин

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН

ИК-прозрачные окна применяются в качестве элемента герметичного корпуса чувствительных элементов микроболометрических датчиков. ИК-окна изготавливаются из кремния, германия, сапфира или других ИК-прозрачных материалов. Собственный коэффициент пропускания (Т) этих материалов в диапазоне длин волн 8–12 мкм недостаточен для достижения требуемой чувствительности. Для увеличения Т окна до значений, превышающих 90 %, применяются такие методы просветления, как микроструктурирование поверхности окна или нанесение дополнительных слоев различных материалов на его поверхность. Нанесение многослойной просветляющей структуры требует дорогостоящего вакуумного обору-

дования. Кроме того, многослойные просветляющие покрытия менее износостойкие и термостойкие чем микроструктуры, выполненные непосредственно из материала окна. Для просветления методом микроструктурирования используются текстуры, представляющие собой периодические массивы элементов пирамидальной, столбчатой, игольчатых и других форм размером до 10 мкм. Для создания таких текстур могут быть использованы методы жидкостного, плазменного травления, лазерной обработки и т. д. Метод жидкостного химического травления не требует сложного технологического оборудования и легко поддается масштабированию. Специфика как изотропного, так и анизотропного химического травления способствует формированию преимущественно пирамидальных структур. В рамках данной работы методом численного моделирования оптимизированы параметры элементарной ячейки пирамидальной микроструктуры в целях достижения максимального Т кремниевого окна в диапазоне длин волн 8–12 мкм. Предложены и опробованы технологические подходы для создания просветления на монокристаллических кремниевых окнах методом жидкостного химического травления.

Расчет проводился в ПО Comsol для ячейки с одним элементом пирамидальной формы с периодическими граничными условиями на стенках. Таким образом моделировался бесконечный массив пирамидальных элементов в плоскости. Расчет проводился для плоско поляризованной вдоль одной из сторон ячейки волны, падающей по нормали к поверхности. При моделировании рассматривались различные значения периода и высоты структуры в диапазоне от 1 до 3 мкм при длинах волн от 6 до 14 мкм. Моделирование показало, что при стремлении периода структуры слева к длине падающей волны в кремнии, пропускание плавно нарастает. Когда период превышает 1,35 длины волны, Т начинает резко падать в силу дифракционных потерь. В результате оптимизации определен период структуры, обеспечивающий полосу пропускания выше 90% в диапазоне длин волн от 8 до 9,5 мкм.

Для получения периодического массива пирамидальных элементов размером 2,2 мкм сформирована маска из позитивного фоторезиста методом контактной фотолитографии. Определены режимы травления монокристаллического кремния в анизотропном (40% водный раствор KOH) и изотропном (HNO_3:HF 3:1) травителях, обеспечивающие скорость травления 1.5 мкм/мин.

Дальнейшая работа будет заключаться в изучении структур, получаемых на кремнии в процессе различных видов травления через сформированную маску, определению их влияния на коэффициент прохождения кремниевого окна на длине волны падающего ИК-излучения в диапазоне 8–12 мкм, а также оптимизации микроструктуры с учетом технологических ограничений.

УДК 535.016

Оценка эффективности ГКР активных подложек из самоорганизованного серебра для длины волны возбуждения 532 нм

***Я. Л. Поздняк*[1,2], *И. А. Богинская*[1], *И. А. Рыжиков*[1,3], *К. Н. Афанасьев*[1], *М. В. Седова*[1]**

[1]Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

Отсутствие одновременно эффективных, универсальных, воспроизводимых и дешевых подложек для реализации эффекта гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) является до сих пор нерешенной проблемой, которая не позволяет использовать ГКР в коммерческих целях для медицинских анализов «на месте», мониторинга окружающей среды, судебно-медицинской экспертизы, контроля качества продуктов питания и т.д. [1]. Метод электронно-лучевого испарения зарекомендовал себя, как многообещающая техника изготовления дешевых, воспроизводимых ГКР подложек при исследовании миоглобина и использовании возбуждающего излучения с длиной волны 785 нм [2].

В работе в качестве аналита использовался сывороточный альбумин человека (ЧСА), длина волны возбуждающего излучения 532 нм, а ГКР активность подложки возникала из-за шероховатого слоя серебра. Усиление комбинационного рассеяния на таких подложках связывают с локализацией плазмон-поляритонных волн на субволновых неровностях поверхности. Этот механизм автоматически приводит к резкой зависимости коэффициента усиления от расстояния до поверхности, которая неоднократно экспериментально наблюдалась [3]. Для изучения зависимости коэффициента усиления от расстояния до подложки в работе использовалась стандартная техника диэлектрических спейсеров из Al_2O_3. Для всех полос колебаний с высоким соотношением сигнал-шум ГКР спектра ЧСА, при высыхании образующего коферинг, было обнаружено слабое экспоненциальное спадание интенсивности спектра с характерной длиной

спадания $H \approx 70$ нм, которое не характерно для ГКР активных подложек. Дополнительное исследование эффективности серебряных подложек показало их невысокую эффективность относительно контрольных образцов: подложек из кремния и Al_2O_3.

Для увеличения эффективности подложек из серебра его шероховатость на наномасштабе была увеличена с помощью подслоя из смеси олова и меди, так как такая смесь при напылении на стекло обладает развитой морфологией. На подслои был нанесен слой серебра разной толщины и проанализирован коэффициент усиления и максимальная мощность лазера, при которой не происходит деградация аналита. В качестве конечной характеристики подложки выступила комбинация этих факторов, так как высокий коэффициент усиления нет возможности использовать, если отсутствует значительный теплоотвод. Выбранный подход позволил определить наиболее эффективные подложки, полученные описанным методом.

Таким образом, было показано, что дальнодействие ГКР составляет порядка 70 нм, что значительно превышает значения из литературных источников и свидетельствует об отсутствии значительной локализации поля в морфологических особенностях подложки. Результаты исследований подложек с более развитой морфологией показали возможность увеличения эффективности серебряной пленки за счет использования теплопроводящих подслоев.

Литература

1. *Li C* [et. al.] Towards practical and sustainable SERS: A review of recent developments in the construction of multifunctional enhancing substrates // J. Mater. Chemistry C. 2021. V.9(35). P. 11517–11552.
2. *Boginskaya I.* [et. al.]. SERS-Active substrates nanoengineering based on e-beam evaporated self-assembled silver films // Appl. Sci. 2019. V.9(19): 3988.
3. *Lee C* [et. al.] Thickness of a metallic film, in addition to its roughness, plays a significant role in SERS activity // Sci. Rep. 2015. V.5(1): 11644.

Секция «Фундаментальные взаимодействия и космология»

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

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

Секретарь: А. И. Шабанов

Дата: 04.04.2024 Время: 10:00

УДК 539.1.074.8

Измерение энергии нейтронов прототипом высокогранулярного нейтронного детектора в столкновениях Xe+CsI@3,8 АГэВ под 0 градусов в физическом сеансе эксперимента BM@N

***А. А. Зубанков*[1,2]**

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Высокогранулярный времяпролетный нейтронный детектор High Granular Neutron Detector (HGND) [1] эксперимента Baryonic Matter at Nuclotron (BM@N) [2] разрабатывается и изготавливается в ИЯИ РАН для измерения азимутальных потоков нейтронов, образующихся в столкновениях тяжелых ионов. BM@N — первый действующий эксперимент с фиксированной мишенью ускорительного комплекса NICA на выведенном пучке Нуклотрона ОИЯИ. Исследовательская программа эксперимента BM@N нацелена на исследование КХД-диаграммы при больших барионных плотностях: изучение образования (мульти) странных гиперонов и поиск гиперядер в ядро-ядерных столкновениях при энергиях ионов пучка до 4,5 АГэВ, изучение азимутальной асимметрии выходов заряженных частиц в столкновениях тяжелых ядер.

Прототип HGND был впервые использован в физическом сеансе эксперимента BM@N по столкновению пучка Xe с энергией 3,8 и 3,0 АГэВ с фиксированной мишенью CsI, толщина которой соответствует вероятности взаимодействия 2%. Такой времяпролетный нейтронный детектор способен идентифицировать и измерять энергию нейтронов, образующихся в тяжелоионных столкновениях при энергиях пучка до 4 АГэВ. Основными положениями прототипа HGND являются положения 0° и 27° к пучку. В первом положении прототип HGND тестировался и использовался для калибровки на нейтронах-спектаторах с энергией пучка. Для измерения спектра нейтронов в области средних быстрот прототип HGND использовался в положении 27°.

Конструкция прототипа HGND включает в себя продольную сегментацию на слои и поперечную на сцинтилляционные ячейки. Активная часть детектора состоит из 15 слоев пластиковых сцинтилляционных детекторов. Первый сцинтилляционный слой используется в качестве вето для идентификации заряженных частиц и не имеет перед собой поглотителя. Электромагнитная часть прототипа HGND общей длиной около 7,5 радиационных длин X_0 состоит из первых 5 слоев после вето-слоя, в которых в качестве поглотителя используются пластины из свинца толщиной 8 мм, позволяющие при анализе различать гамма-кванты от нейтронов. Адронная часть прототипа состоит из оставшихся 9 слоев с медным поглотителем толщиной 30 мм. Общая длина детектора в единицах ядерных длин составляет около $2{,}5\lambda_{int}$ для эффективной регистрации нейтронов высоких энергий. Активные слои состоят из матрицы 3 × 3 из сцинтилляционных ячеек размером 40 × 40 × 25 мм^3 каждая. Свет с каждой считывается отдельным MPPC Hamamatsu S13360-6050PE с чувствительной площадью 6 × 6 мм^2, размером пикселя 50 мкм, общим числом пикселей 14400, коэффициентом усиления $1{,}7 \times 10^6$ и эффективностью регистрации фотонов PDE 40%. Время и амплитуда сигнала считываются модулями время-цифрового преобразователя TQDC.

Полученное ранее в результате вычислений временное разрешение ячеек 6–11 слоев прототипа HGND, которые и участвуют в детектировании основной доли нейтронов, составляет 134 ± 29 пс и достаточно для идентификации и реконструкции энергии нейтронов вплоть до 4 ГэВ.

В работе представлены результаты реконструкции энергетического спектра нейтронов в положении 0° к пучку по времени пролета частицы. Для отбора событий центральных и полу-центральных ядерных реакций одного иона ксенона с мишенью использовался триггер CCT2, который позволяет отобрать события с центральностью от 0 до 60%. Реконструированные по времени пролета прототипом HGND нейтроны отбираются по самому быстрому срабатыванию ячейки с учетом порога в 0,5 MIP и отбора заряженных частиц. Для оценки влияния фонов от нейтронов не из мишени были взяты наборы данных с пустой мишенью. Доля нейтронов на один падающий на мишень ион ксенона для набора с мишенью CsI 2%, как и ожидалось, превышает число зарегистрированных нейтронов в наборе без мишени. Реконструированный спектр нейтронов представлен на рис. 1, где синяя гистограмма соответствует нейтронам в наборе данных без мишени и составляет 18,5% от числа нейтронов с мишенью, обозначенной красной линией.

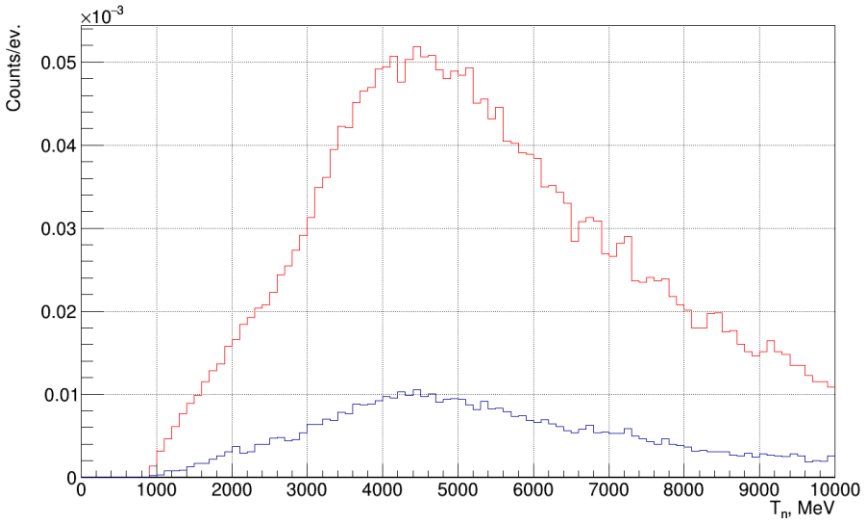


Рис. 1. Реконструированный по времени пролета энергетический спектр нейтронов, нормированный на поток падающих ионов, для наборов данных с мишенью (красная линия) и без мишени (синяя линия) в положении прототипа HGND под 0° к пучку

Литература

1. *Guber F.* [et al.]. Development of High Granular Neutron Time-of-Flight Detector for the BM@N experiment // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2309.09610.
2. *Kapishin M.* Studies of baryonic matter in the BM@N and MPD experiments at Nuclotron/NICA // POS. Corfu Summer Institute 2018 “School and Workshops on Elementary Particle Physics and Gravity” (CORFU2018). 2019. V. 347: 188. DOI: 10.22323/1.347.0188.

УДК 539.1.074.88,539.1.078

Полноразмерный времяпролетный детектор нейтронов для эксперимента BM@N

***А. И. Махнев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Рассмотрены назначение, физическая схема, строение измерительного тракта и прогресс по сборке полноразмерной версии времяпролетного детектора быстрых нейтронов для эксперимента BM@N [1].

Детектор предназначен для идентификации и измерения энергии нейтронов, образующихся в процессе ядро-ядерных столкновений, в диапазоне от 300 МэВ до 4 ГэВ. Измерение энергии выполняется за счет измерения времени пролета нейтронов от момента попадания частицы пучка в фиксированную мишень до момента попадания нейтрона в детектор.

Детектор разбит на два устройства, смонтированных на удалении от мишени, ниже и выше оси пучка. Каждое из устройств состоит из сборки чередующихся слоев (модулей) из поглотителя и сцинтилляционных чувствительных элементов. Количество таких слоев (сцинтиллятор + поглотитель) нейтронного детектора — 8 на устройство. Предусмотрен также вето-детектор для отсечки заряженных частиц.

Сцинтилляционные чувствительные элементы сопряжены с фотоприемником (многопиксельным счетчиком фотонов) и светодиодом, позволяющим выполнять верификацию собранного измерительного тракта. Фотоприемники смонтированы на печатном узле, несущем также считывающую аналоговую электронику и компаратор для выполнения ToT (Time-Over-Threshold) преобразования. Сборка из сцинтилляторов и фотоприемников упакованы в светозащитный корпус. Поглотители и сцинтилляционные сборки монтируются на легковесную раму из конструкционного алюминиевого профиля, как показано на рис. 1 [2].

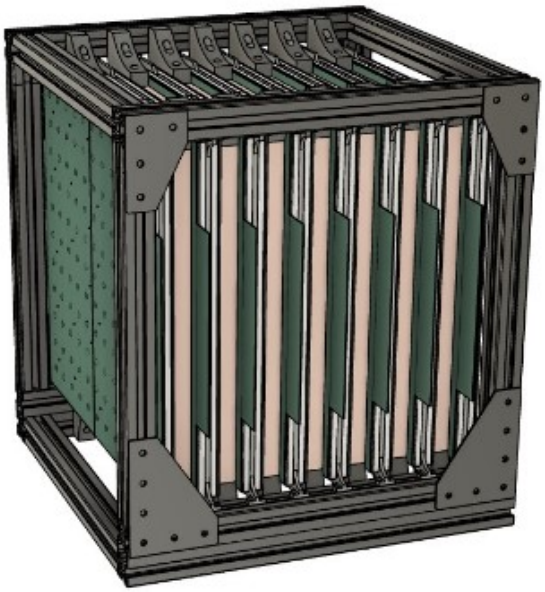
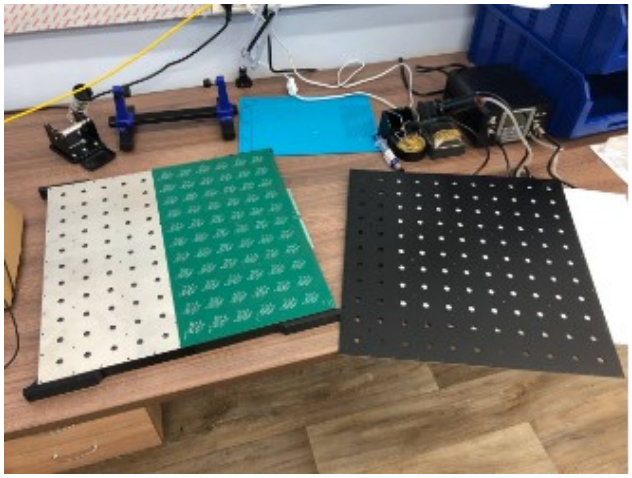
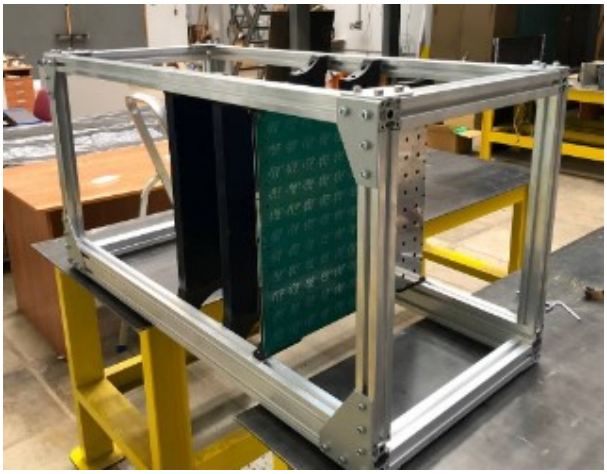


Рис. 1. Твердотельная модель детекторного блока

В данный момент выполняется сборка первого детекторного модуля (рис. 2*а*) и макета механического устройства детектора (рис. 2*б*). Сборка позволяет проверить конструкторские решения и возможность развертывания детектора на эксперименте.



а



б

Рис. 2. Сборка детекторного модуля (*а*); механический макет (*б*)

Использование ToT-метода позволяет снизить объем передаваемой и обрабатываемой информации, а также позволяет использовать конструкторские и схемотехнические решения, предназначенные для передачи информации по высокоскоростным дифференциальным линиям по стандарту LVDS. [3] Так, вся электроника с высоким тепловыделением — ПЛИС и его обслуживающие блоки — вынесены на отдельные платы, соединяемые с детекторными модулями посредством краевых разъемов PCIe, позволяющих значительно увеличить надежность и упростить монтаж за счет отказа от кабелей, несущих несимметричные линии.

Литература

1. *Kapishin M.* [et al.]. Heavy Ion BM@N and MPD Experiments at NICA // JPS Conf. Proc. 2020. JPS Conf.Proc. V.32:010093.

2. *Guber F.* [et al.]. Development of High Granular Neutron Time-of-Flight Detector for the BM@N experiment // e-Print: 2309.0961 [hep-ex].
3. *Finogeev D.* [et al.]. Development of a 100 ps TDC based on a Kintex 7 FPGA for the high granular neutron time- of-flight detector for the BM@N experiment // Nucl. Instrum. Meth. A. 2024. V.1059: 168952.

УДК 539.1.07

Измерение формы адронного ливня в калориметрическом детекторе эксперимента ATLAS

***А. Д. Тропина*[1,2], *Н. А. Гусейнов*[2], *И. Р. Бойко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ)

В настоящее время надежное математическое моделирование аппаратного обеспечения эксперимента является критически важным аспектом физики высоких энергий. Целью данной работы являлась валидация официального моделирования GEANT4, используемого коллаборацией ATLAS. Был измерен продольный профиль адронного ливня с использованием тестовых пучков адронов на модуле адронного калориметра эксперимента ATLAS, и было проведено сравнение результатов измерений с GEANT4 моделированием.

В работе использовались данные эксперимента Tile Calorimeter (TileCal) TestBeam на выведенном из ускорителя SPS пучке. Изучалась установка (рис. 1), состоящая из трех модулей адронного калориметра ATLAS: двух модулей центрального блока, LB65 и M0, а также одного бокового блока расширенного барреля — EBC модуля. Подробное описание экспериментальной установки приведено в работе [1]. На пути пучка находились вспомогательные детекторы: пороговый черенковский счетчик для идентификации частиц, две проволочные камеры для контроля положения пучка и отклонения частицы от его оси и два сцинтиллятора для отбора одночастичных событий.

В эксперименте исследовались пучки адронов с энергиями 20, 50, 80 и 100 ГэВ. Для исследования продольного профиля адронного ливня на глубине до 20 λ пучок направлялся в модуль LB65 под углом -90˚ (рис. 1). Здесь и далее λ — длина адронного взаимодействия, рассчитанная для рассматриваемой конфигурации эксперимента и составляющая 25,1 см.

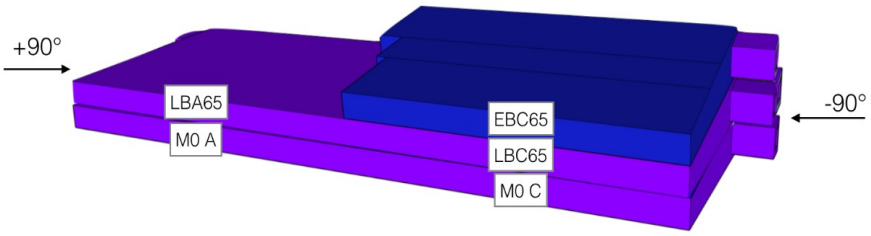


Рис. 1. Расположение модулей в эксперименте TileCal TestBeam с указанием направления оси пучка

Пучок представлял собой смесь адронов, мюонов и электронов. Поскольку мюоны проходят модуль насквозь и имеют равномерное энерговыделение на всем пути, мы идентифицировали их, требуя, чтобы энергия, измеряемая в дальних ячейках калориметра, была выше порогового значения, подбираемого отдельно для каждой энергии. Для идентификации электронов в пучке использовалась комбинация двух переменных:

$$C_{long} = \sum_c \frac{E_c}{E_{beam}} \tag{1}$$

$$C_{tot} = \frac{1}{\sum_c E_c^{\alpha}} \sqrt{\sum_c \frac{\left(E_c^{\alpha} - \frac{\sum_c E_c^{\alpha}}{N_{cell}}\right)^2}{N_{cell}}} \tag{2}$$

здесь E_{beam} — энергия пучка, E_c — энергия в ячейке с индексом c, N_{cell} — количество ячеек, используемых в суммировании, α — безразмерный параметр, подобранный для лучшего разделения адронной и электронной компонент пучка. В формуле (1) суммирование ведется по ячейкам, расположенным на

глубине $< 2\,\lambda$, в формуле (2) — по всем ячейкам модуля. Распределение в плоскости $C_{long} - C_{tot}$ проецировалось на ось, обеспечивающую оптимальное разделение адронов и электронов, и применялся отбор, оставляющий не более 0,3% электронных событий [2].

Разделение протонной и пионной компонент пучка проводилось по черенковскому счетчику, давление в котором было подобрано так, чтобы протоны не давали сигнала. Количество несрабатываний детектора на пионы, связанное с его неэффективностью, оценивалось по мюонной компоненте пучка, в силу близости масс пиона и мюона (по сравнению с массой протона). Доля пионных событий в протонной выборке была оценена и учтена при GEANT4 моделировании.

В работе использовался официальный модуль GEANT4 [3], с геометрией, соответствующей конфигурации эксперимента. В нем рассматривалась модель взаимодействия частиц FTFP_BERT_ATL [4]. Также был подключен корректный закон Бирка для световыхода сцинтиллятора. Для лучшего согласия с данными подбирались следующие параметры: расстояние от источника частиц до модуля и поперечные размеры пучка.

Модуль был разделен на 20 слоев по глубине. На рис. 2 представлены результаты измерения продольного профиля для пионной и протонной компонент пучка в зависимости от глубины нахождения слоя. Различные цвета точек соответствуют различным энергиям. Для разделения шумов электроники и сигналов от ливней, рассматривались только те слои, в которых энерговыделение, полученное в моделировании, превышало 1 МэВ. На рис. 3 приведено сравнение результатов измерений и моделирования энергии, выделившейся в слоях модуля. Все приведенные погрешности являются статистическими. В стандартной конфигурации эксперимента ATLAS длина калориметра составляет 7,4 λ в направлении, перпендикулярном оси пучка. На этой длине занижение моделируемого энерговыделения по сравнению с экспериментом относительно невелико и уже было детально исследовано и учтено коллаборацией. Однако наблюдаемое расхождение на большей глубине свидетельствует о неприменимости модели GEANT4, используемой коллаборацией ATLAS, в подобных конфигурациях эксперимента. Эти несоответствия будут иметь большое значение для будущих экспериментов на более высоких энергиях, таких как планируемый в ЦЕРНе 100-километровый коллайдер FCC и аналогичная установка в Китае — CEPC.

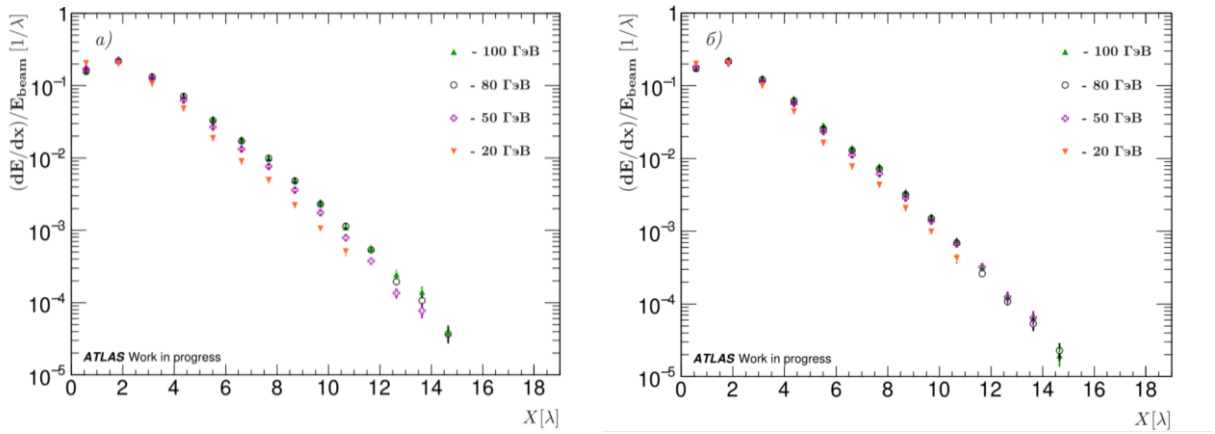


Рис. 2. Продольный профиль адронного ливня при различных энергиях для пионной (*а*) и протонной (*б*) компонент пучка, в зависимости от глубины нахождения слоя. По вертикальным осям показана доля энергии пучковой частицы, выделяемая на единицу длины адронного взаимодействия

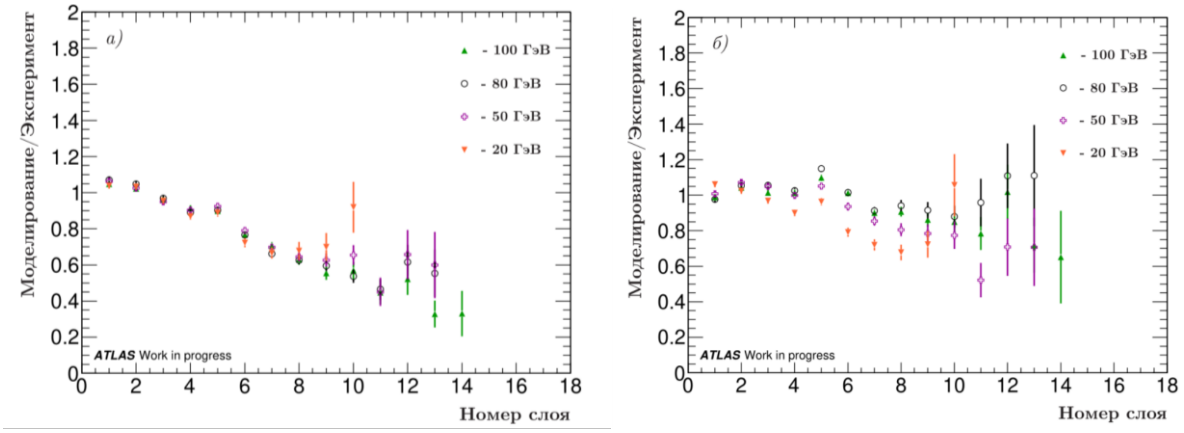


Рис. 3. Отношения энергии, выделившейся в слоях модуля, в данных и моделировании при различных энергиях для пионной (*а*) и протонной (*б*) компонент пучка, в зависимости от номера слоя вдоль оси развития ливня

Литература

1. *TileCal Collaboration.* Testbeam studies of production modules of the ATLAS Tile Calorimeter // Nucl. Instrum. Methods A. 2009. V. 606. P. 362–394.
2. *Cascella M.* [et al.]. Comparison between Geant4, Fluka and the TileCal test-beam data // Nucl. Instrum. Methods A. 2010. V. 617 P. 74–77.
3. *Agostinelli S.* [et al.]. GEANT4 - a simulation toolkit // Nucl. Instrum. Methods A. 2003. V. 506 P. 250–303.
4. Guide for Physics Lists // GEANT4 official website [электронный портал]. URL: http://geant4-userdoc.web.cern.ch/geant4-userdoc/UsersGuides/PhysicsListGuide/html/index.html.

УДК 539.1.074

Концепции сцинтилляционного детектора нейтрино со сверхнизким энергетическим порогом

***А. О. Стрижак*[1,2], *А. Г. Баранов*[1,3]**

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Московский инженерно-физический институт (национальный исследовательский ядерный университет)

В 2020 году коллаборация XENON представила в статье [1] спектр нейтрино, в котором наблюдалось несоответствие с ожидаемым спектром в области низких энергий. В статье было предложено три возможных объяснения данного эффекта, одно из которых — ненулевой магнитный момент солнечных нейтрино. Для таких низкоэнергетических нейтрино сечение регистрации сравнительно велико. В связи с этим появляется возможность предложить концепцию высокоэффективного детектора нейтрино для низкопороговых энергетических измерений (~100 эВ).

Для подобных измерений обычно используют полупроводниковые детекторы. Однако их высокой стоимости в качестве альтернативы со сходными параметрами был предложен дизайн установки на основе сцинтилляционных детекторов сцинтилляторами $CsI(Tl)$ и $SrI_2(Eu)$, сигнал с которых может считываться кремниевыми фотоумножителями (SiPM). Оба типа сцинтилляторов обладают световыходом более 100 ф.э./кэВ при низких температурах. В начале концепция детектора предполагала использование сцинтиллятора $CsI(Tl)$, обладающего нужным световыходом при криогенных температурах. К преимуществам $SrI_2(Eu)$ можно отнести высокий световыход при гораздо более высоких температурах T≈–65°C. Оптическая связь SiPM при такой температуре ниже, чем при криогенных измерениях, что что значительно увеличивает точность измерений.

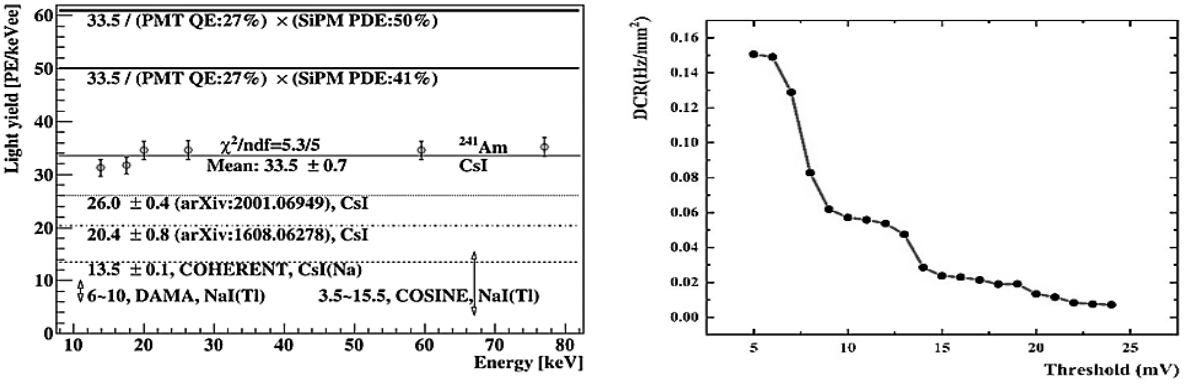


Рис. 1. Световыход сцинтилляторов при температуре LN_2 в различных экспериментах (слева) и зависимость DCR от порога регистрации в SiPM (справа)

В данной работе представлено исследование светосбора прототипа модуля детектора, состоящего из ячейки сцинтиллятор-SiPM. На рис. 1, слева, представлены собранные авторами [2] данные по светосбору с нескольких экспериментов по исследованию возможности создания подобных сцинтилляционных детекторов на основе сцинтилляторов CsI и NaI(Tl) при температуре жидкого азота с ФЭУ в качестве фотодетектора. Авторы также предположили значительное увеличение светосбора при использовании SiPM для считывания сигнала (две верхние горизонтальные линии). Традиционно SiPM не используются

для считывания сигналов из-за высокого темнового тока (DCR) при комнатной температуре. DCR значительно падает при низкой температуре (рис. 1, справа). В статье [3] авторы представили экспериментальный критерий пригодности SiPM для низкопороговых измерений DCR < 0.1 Гц/мм^2.

Сигнал с $CsI(Tl)$ -сцинтиллятора (куб размером 15x15x15мм^3) считывается двумя SiPM (Hamamatsu MPPC S14161-3050HS-04), расположенными на торцах сцинтиллятора. Модуль сцинтилляционного детектора помещен в светоизиоляционную емкость, погруженную в жидкий азот. Сигнал с $SrI_2(Eu)$ (куб 13x13x13мм^3) считывается с помощью матрицы SiPM (ARRAYJ−60035−64P) производства компании Sensl при рабочей температуре $T = -32°C$. Сигналы записываются АЦП с временем дискретизации 10 нс и максимальной шириной кадра 20 мкс. Для низкого порога регистрации при высокой температуре АЦП может записывать не все шумы. По этой причине количество сигналов выше порога записывается отдельно.

Первый этап исследования посвящен изучению характеристик, используемых для модулей детектора кремниевых фотоумножителей. На рис. 2 (слева) показано исследование зависимости оптической связи матрицы SiPM от ее температуры при двух рабочих напряжениях 28 В и 29 В. Справа показана экспериментальная зависимость DCR от температуры для порога 0.5 ф.э. (синим цветом), 1.5 ф.э. (оранжевым цветом) и 2.5 ф.э. (желтым цветом). Для порога 2.5 кэВ критерий из [3] выполнен.

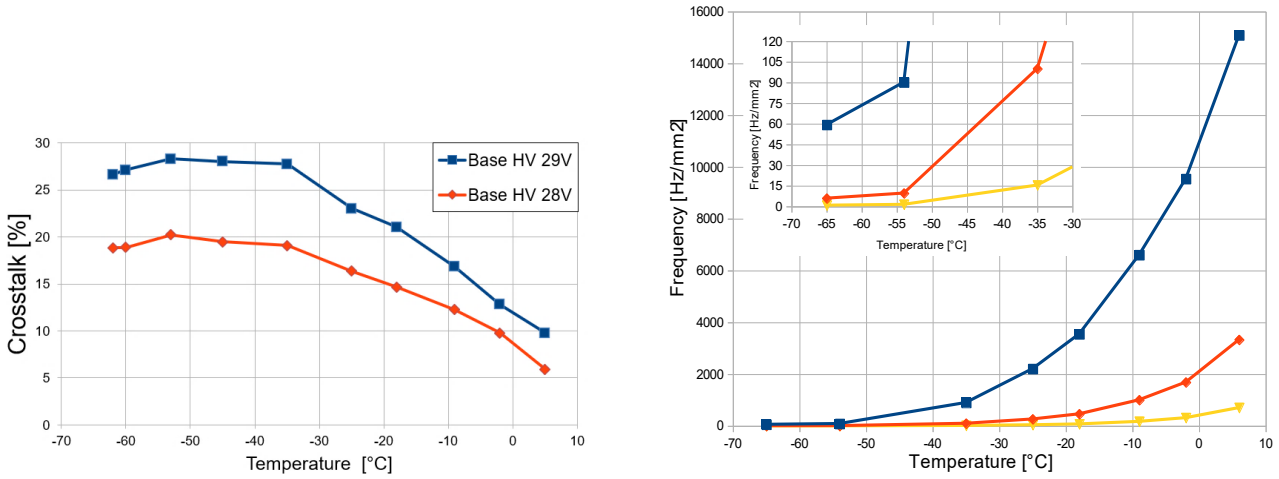


Рис. 2. Оптическая связь SiPM (слева) и зависимость частоты электронных шумов от температуры (справа)

На рис. 3 показан спектр энерговыделения в сцинтилляционном детекторе $CsI(Tl)$, полученный при помощи источника Co57 (гамма-кванты с энергией 122 кэВ) для SiPM-матрицы у одного из торцов сцинтиллятора. Слева показана область малых сигналов, на которой видны амплитудные пики, соответствующие различному количеству фотоэлектронов (6000 каналов на фотоэлектрон). Справа показано положение энергетического пика Co57 122 кэВ. Можно получить количество фотоэлектронов, соответствующее энерговыделению 122 кэВ: 2250 ф.э. При суммировании светосбор обоих матриц было получено значение 34.5 ф.э./кэВ.

На рис. 4 виден спектр энерговыделения $SrI_2(Eu)$-детектора, полученный на источнике Am241. Слева — область малых сигналов, в которой можно найти расстояние между одноэлектронными пиками, составляющее 8750 каналов. Справа — энергетический пик 60 кэВ, из которого можно получить количество фотоэлектронов, соответствующее энерговыделению в 60 кэв: ~2137 ф.э. Светосбор сцинтилляционного детектора $SrI_2(Eu)$ составляет ~35.6 ф.э./кэВ.

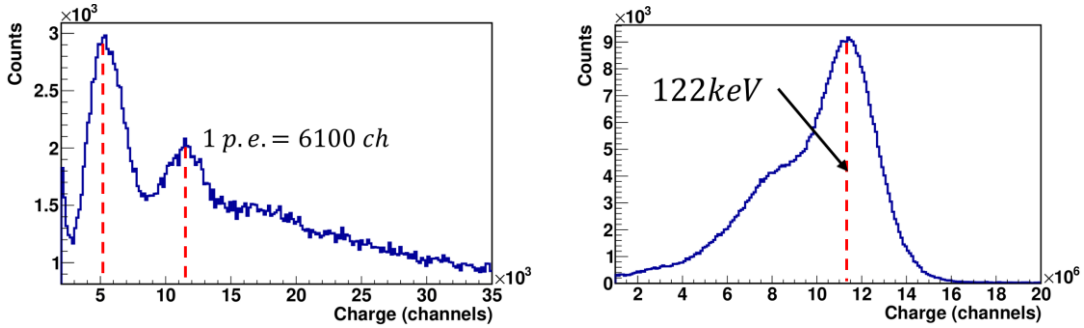


Рис. 3. Спектры одноэлектронного шума (слева) и Co57 (справа) для сцинтиллятора $CsI(Tl)$

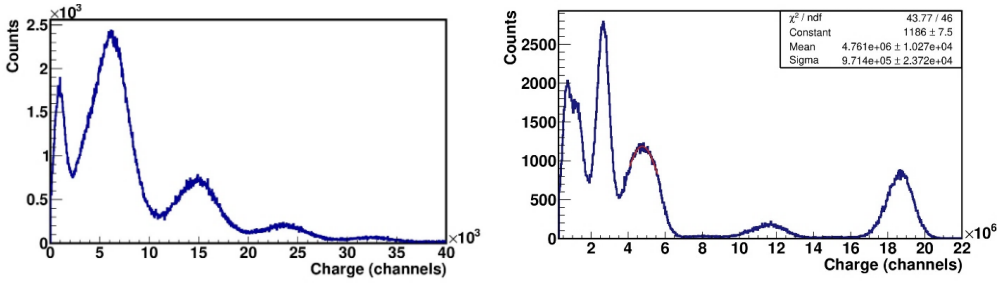


Рис. 4. Спектры одноэлектронного шума (слева) и Am241 (справа) для сцинтиллятора $SrI_2(Eu)$

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода».

Литература

1. *Aprile E.* [et al.]. Excess electronic recoil events in XENON1T // Phys. Rev. D. 2022. V. 102(7): 072004.
2. *Ding K., Chernyak D., Liu J.* Light yield of cold undoped CsI crystal down to 13 keV and the application of such crystals in neutrino detection // Eur. Phys. J. 2020. V. 80: 1146.
3. *Liu F.* [et al.]. Characterization of a Mass-Produced SiPM at Liquid Nitrogen Temperature for CsI Neutrino Coherent Detectors // Sensors. 2022. V. 22: 1099.

УДК 539.126

Изучение распада $B_s^0 \to J/\psi\phi\phi$ в эксперименте CMS

***А. С. Седельников*[1], *Р. Н. Чистов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Распад $B_s^0 \to J/\psi\phi\phi$ был обнаружен коллаборацией LHCb [1] на данных, набранных в протон-протонных столкновениях с энергиями в СЦИ $\sqrt{s}$ = 7 ТэВ и $\sqrt{s}$ = 8 ТэВ в период с 2011 по 2012 год, соответствующих интегральной светимости 3 $фб^{-1}$. В работе было проведено измерение массы B_s^0 и относительной вероятности распадов. Низкое число восстановленных событий 128 ± 13 приводит к значительным статистическим погрешностям, а также не позволяет делать четкие выводы о наличии каких- либо промежуточных состояний. Тем не менее на основе результата LHCb в работе [2] были вычислены спектры инвариантных масс с использованием моделей, учитывающих наличие двух промежуточных резонансов с квантовыми числами $J^P = 0^+, 0^-, 2^+$ в спектре $\phi\phi$ и двух резонансов с $J^P = 1^+$ в спектре $J/\psi\phi$.

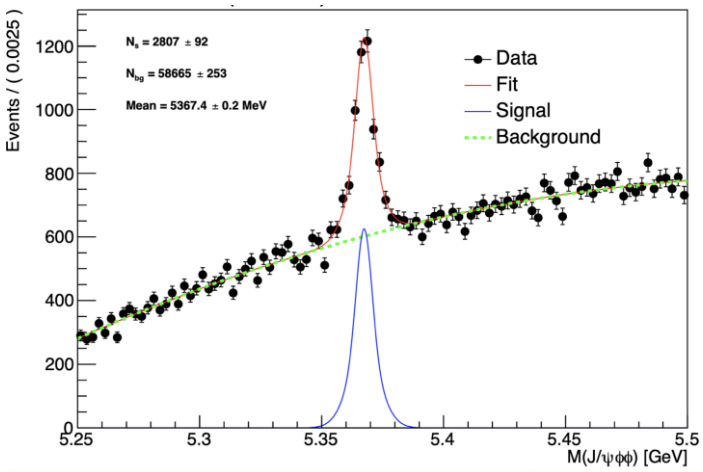


Рис. 1. Распределение инвариантной массы продуктов распада B_s^0 в исследуемом канале

В настоящей работе представлены результаты исследования распада $B_s^0 \to J/\psi\phi\phi$ на данных эксперимента CMS, набранных с 2016 по 2018 год. На рис. 1 изображено распределение инвариантной массы $J/\psi\phi\phi$

с сигналом B_s^0 мезона. В результате аппроксимации распределения двойной функцией Гаусса для сигнала и полиномом второй степени для фона получено N = 2807 ± 92 сигнальных событий. В работе восстановлены два нормировочных распада $B_s^0 \to J/\psi\phi$ и $B_s^0 \to \psi(2S)\phi$, с использованием которых измерены относительные вероятности распадов. Также получены промежуточные спектры инвариантных масс $J/\psi\phi$ и $\phi\phi$.

Литература

1. *Aaij R.* [et al.]. Observation of the $B_s^0 \to J/\psi\phi\phi$ decay // J. High Energy Phys. 2016. V. 2016. P. 1–18.
2. *Kozhevnikov A. A.* $\phi\phi$ and $J/\psi\phi$ mass spectra in decay $B_s^0 \to J/\psi\phi\phi$ // Phys. Rev. D. 2017. V. 95: 014005.

УДК 539.1

Применение методики слепого анализа к поиску событий конверсионного распада омега-мезона в эта-мезон и электрон-позитронную пару

***А. К. Нарваткина*[1,2]**

[1]Новосибирский государственный университет
[2]Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Мотивация к изучению распада омега-мезона в эта-мезон и электрон-позитронную пару состоит в проверке модели векторной доминантности. Предсказываемая относительная вероятность распада $\omega \to \eta e^+ e^-$ (Рис. 1) в рамках этой модели находится в диапазоне $(2{,}0–6{,}0) \cdot 10^{-6}$ [1, 2]. На данный момент экспериментально получен верхний предел, сам процесс еще не наблюдался.

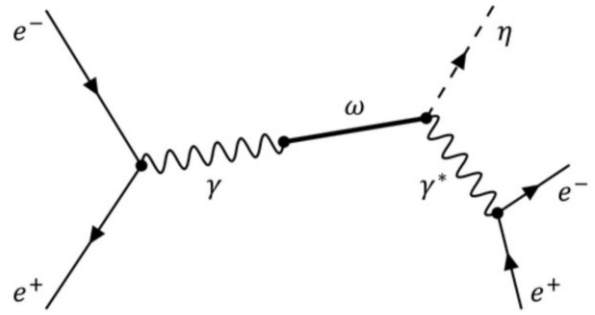


Рис. 1. Диаграмма Феймана процесса $e^+e^- \to \omega \to \eta e^+e^-$

На детекторе КМД-3 набран интеграл светимости в области масс ρ- и ω-мезонов, равный около 30 пб$^{-1}$, который используется в анализе. Для изучения распада $\omega \to \eta e^+e^-$ выбрана мода $\eta \to \pi^+\pi^-\pi^0$ с последующим распадом $\pi^0 \to 2\gamma$. В конечном состоянии ожидается два фотона, два заряженных пиона и электрон-позитронная пара. Основным источником фоновых событий является распад $\omega \to \pi^+\pi^-\pi^0$ и последующий Далиц-распад $\pi^0 \to e^+e^-\gamma$.

Так как ожидаемое количество событий распада мало, для большей объективности используется методика слепого анализа, в рамках которой область в пространстве измеряемых переменных, насыщенная сигнальными событиями, скрывается. В качестве таких переменных используются модуль полного импульса лептонной пары $P_\Sigma(e^+e^-)$ и инвариантная масса нейтральной пары адронов и пары фотонов $M_{inv}(\pi^+\pi^-2\gamma)$.

Данные с детектора КМД-3 проходят процедуру реконструкции событий, которая преобразовывает набор сигналов в каждой детектирующей системе в физические данные. Так, электромагнитный калориметр регистрирует фотоны, рождающиеся в результате e^+e^--аннигиляции, а дрейфовая камера позволяет восстанавливать треки заряженных частиц. В процессе анализа было проведено моделирование, как сигнальных событий, так и событий основного фона. Разработаны и применены первичные условия отбора сигнальных событий, целью которых являлось выделение событий с правильной сигнатурой и определение типов частиц у заряженных треков [3]. После прохождения условий отбора было получено распределение фоновых событий. Далее проводилась аппроксимация двумерного распределения событий в пространстве выбранных переменных, как с закрытием области, так и без него (рис. 2). В качестве аппроксимирующей функции использовалось двумерное распределение, переменные которого факторизуются при повороте.

Сигнальные события можно отбирать, вычисляя недостающую массу $M_{miss}^{e^+e^-\pi^+\pi^-}$ к e^+e^-- и $\pi^+\pi^-$-парам, которая в сигнальном событии соответствует массе π^0. На данных моделирования проведено сравнение количества фоновых событий в закрытой области, полученное с помощью аппроксимации с их действительной величиной при разной степени подавления фоновых событий. Такое сравнение проводилось двумя разными аппроксимирующими функциями, для первой вдоль одной оси использовалась логарифмическая модификация распределения Гаусса, а вдоль другой — распределение Гаусса, для второй распределение Гаусса заменялось профилем Фойгта. Результаты сравнения представлены в табл. 1, по итогам которых была выбрана функция с использованием профиля Фойгта.

На данный момент были выбраны переменные для методики слепого анализа, применены первичные критерии отбора и подобрана аппроксимирующая функция. В дальнейшем предстоит определить вторичные критерии обора, которые будут подавлять достаточное количество фоновых событий, описать зависимость фона от этих критериев отбора и провести анализ распределения событий в экспериментальных данных.

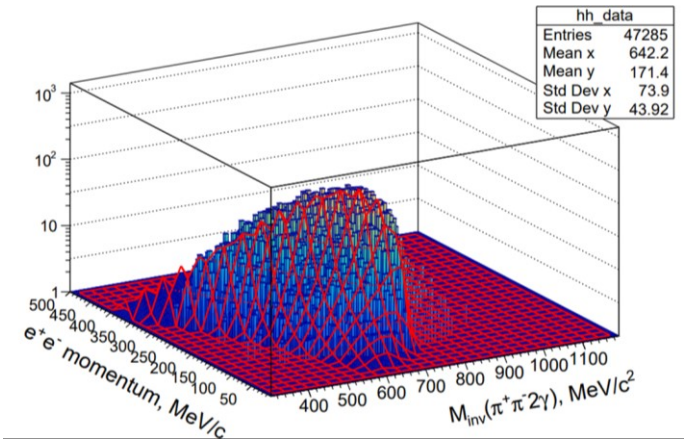


Рис. 2. Распределение основных фоновых событий по суммарному импульсу лептонной пары $P_\Sigma(e^+e^-)$ и инвариантной массе $M_{inv}(\pi^+\pi^-2\gamma)$, аппроксимированное двумерной функцией, для данных моделирования

Таблица 1. Оценка событий в закрытой области

Отбор событий по недостающей массе к e^+e^-- и $\pi^+\pi^-$-парам	Количество событий в закрытой области	Значения, предсказанные аппроксимирующей функцией (распределение Гаусса)	Значения, предсказанные аппроксимирующей функцией (профиль Фойгта)	Различие результатов (в ед. стандартных отклонений)
Без применения обора	5008	4533	4856	2,1σ
$M_{miss}^{e^+e^-\pi^+\pi^-} > 32\ \frac{\text{МэВ}}{\text{с}^2}$	1254	1065	1113	4,0σ
$M_{miss}^{e^+e^-\pi^+\pi^-} > 46\frac{\text{МэВ}}{\text{с}^2}$	598	486	506	3,8σ
$M_{miss}^{e^+e^-\pi^+\pi^-} > 58\frac{\text{МэВ}}{\text{с}^2}$	285	273	301	0,9σ

Литература

1. *Terschlüsen C., Leupold S.* Electromagnetic transition form factors of light vector mesons // Phys. Lett. B. 2010. V. 691(4). P. 191–201. DOI: 10.1016/j.physletb.2010.06.033.
2. *Faessler A.* [et al.]. Dilepton spectra from decays of light unflavored mesons // Phys. Rev. C: Nucl. Phys. 2000. V. 61(3): 035206. DOI: 10.1103/PhysRevC.61.035206.
3. *Мишин В. В.* Поиск событий конверсионного распада ω → ηe⁺e⁻ на детекторе КМД-3 // Материалы 59-й Международной научной студенческой конференции. Физика элементарных частиц, астрофизика и космология. — Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2021. С. 238.

УДК: 539.1.074.4

Определение момента времени столкновения пучков на установке ALICE Большого адронного коллайдера (ЦЕРН) в сеансе Run 3

А. А. Фурс, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, М. А. Суханов

Институт ядерных исследований РАЕ

Основной задачей эксперимента ALICE Большого адронного коллайдера (БАК) является изучение свойств ядерной материи при экстремально высокой температуре и плотности энергии, образующейся в ядро-ядерных столкновениях на встречных пучках [1]. Важной компонентой для анализа экспериментальных данных ALICE является идентификация заряженных частиц (PID) при помощи трековых детекторов (TPC, ITS, MFT) и времяпролетного детектора (TOF). Ключевым фактором необходимым для идентификации заряженных частиц времяпролетным методом является измерение момента времени столкновения пучков. В ходе предыдущего сеанса БАК Run 2 для момента времени столкновения пучка [2] использовались времяпролетный детектор TOF и черенковский детектор T0. После сеанса Run 2, в течении апгрейда LHC Long Shutdown 2 был разработан и введен в эксплуатацию новый многофункциональный передний детектор FIT [3], объединяющий три суб-детектора: FT0 — черенковский детектор, FV0 и FDD — сцинтилляционные детекторы. FIT вместе с обновленной времяпролетным детектором TOF — используются для определения момента времени столкновения пучков на установке ALICE в сеансе Run 3.

В данной работе представлен обзор методологии измерения момента времени столкновения пучков на установке ALICE в течении третьего сеанса БАК за время 2022–2023.с

Литература

1. *Abelev B.* [et al., ALICE Collaboration]. Upgrade of the ALICE experiment: letter of intent // J. Phys. G. Nucl. Part. Phys. 2014. V. 41: 087001, DOI: 10.1088/0954-3899/41/8/087001.
2. *Adam J.* [et al., ALICE Collaboration]. Determination of the event collision time with the ALICE detector at the LHC // Eur. Phys. J. Plus 2017. V. 132, 99. DOI: 10.48550/arXiv.1610.03055.
3. *Trzaska W. H.* [et al., ALICE Collaboration]. New ALICE detectors for Run 3 and 4 at the CERN LHC // Nucl. Instrum. Methods A. 2020. V. 958: 162116. DOI: 10.1016/j.nima.2019.04.070.

УДК 539.126.4

Обнаружение и измерение относительной вероятности распада $B^0 \longrightarrow \psi(2S)\phi K_s^0$ в эксперименте CMS

***А. В. Богер*[1], *Р. Н. Чистов*[1,2]**

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

Одной из задач экспериментов на Большом адронном коллайдере (БАК) является амплитудный анализ распадов частиц, изучение распределений инвариантных масс продуктов распадов. Это способствует лучшему пониманию природы взаимодействий в теориях Стандартной модели (СМ) и квантовой хромодинамики, открывает возможности для поиска новой физики за пределами СМ.

В последние годы в экспериментах на БАК (в основном, в эксперименте LHCb) особое внимание уделяется распадам короткоживуших частиц -- резонансов. Их изучение позволяет находить новые экзотические состояния. Все вышесказанное мотивирует изучить возможность восстановления хорошего сигнала B0 мезона из последних данных эксперимента CMS. Отобранные события могут быть впоследствии использованы для поиска новых состояний.

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

При восстановлении кандидатов сначала ищутся два мюона с противоположными зарядами, треки которых фитируются в общую вершину для получения $\psi(2S) \longrightarrow \mu^+\mu^-$. Затем выбирается два адронных трека с противоположными зарядами для восстановления распада $\phi \longrightarrow K^+K^-$. После их фитирования в общую вершину распада ϕ, ищется еще один трек (предполагаемый K_s^0). После этого $\psi(2S)$, ϕ и K_s^0 кандидаты комбинируются вместе для восстановления B^0 кандидата и его траектории, причем выбирается наилучшая первичная вершина (PV) распада (наибольший 3D-косинус между направлением на PV и импульсом b-адрона).

Как в процессе восстановления распада, так и в ходе анализа полученных данных, для получения сигнальных событий применяются следующие критерии отбора частиц и их треков.

Отбор мюонов: $p_T(\mu^{\pm}) > 4$ ГэВ/ c , а также вероятность фита димюонной вершины $(\mu^+\mu^-)_{vtxprob} > 0.01$, и массовое окно димюонного кандидата: $3.536GeV < m_{\mu^+\mu^-} < 3.836GeV$ для $\psi(2S) \longrightarrow \mu^+\mu^-$, $(\psi(2S))_{detachsignificance} > 3$, $p_T(\psi(2S)) > 7$ ГэВ/c;

Отбор ϕ: массовое окно $1.01GeV < m_\phi < 1.03GeV$, $p_T(K^{\pm}) > 0.8$ ГэВ/c, $p_T(\phi) > 0.8$ ГэВ/c

Отбор K_s^0: вероятность фита в общую вершину $(K_s^0)_{vtxprob} > 0.01$, $p_T(K_s^0) > 1$ ГэВ/c, косинусы больше чем 0.9999 (в поперечной плоскости);

Отбор B^0: вероятность фита B^0 с димюонным кандидатом $(B^0)_{vtxprob} > 0.01$, значимость отлета в поперечной плоскости $(B^0)_{detachsignificance} > 5$, $p_T(B^0) > 10$ ГэВ/c, массовое окно $5.0GeV < m_{B^0} < 5.6GeV$, а также косинусы углов между направлением на PV и импульсом $p_T(B^0)$, между направлением на вершину распада B^0 и импульсом больше чем 0.99 (в поперечной плоскости).

На рис. 1 представлено распределение по инвариантной массе $\psi(2S)\phi K_s^0$ отобранных кандидатов. Виден значительный пик в районе PDG-массы B^0-мезона [1] — 5279.58 ± 0.17 МэВ. Это распределение с использованием ПО RooFit [3] аппроксимируется суммой сигнальной и фоновой компонент, где сигнал описывается двумя функциями Гаусса, а фон — полиномом 2-й степени с порогом в сумме инвариантных масс частиц распада, со свободными при фитировании параметрами. Результаты также представлены на рис. 1. Аппроксимация дает 127 ± 15 сигнальных событий, а полученная из фита масса B^0-мезона, 5279.93 ± 0.23, находится в хорошем согласии с данными PDG.

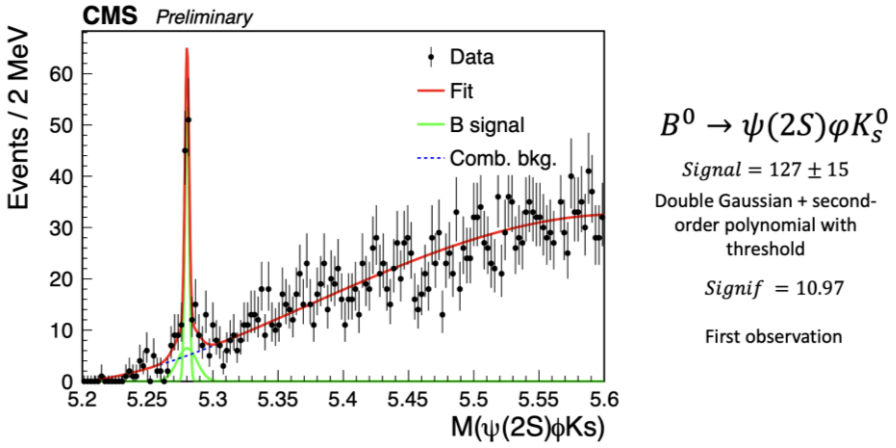


Рис. 1. Распределение по инвариантной массе отобранных $B^0 \longrightarrow \psi(2S)\phi K_s^0$ кандидатов. Черные точки показывают данные, красная сплошная линия — полную аппроксимирующую функцию, зеленая — сигнал, синяя — фон

Подобный анализ проводился экспериментом LHCb в распаде $B^+ \longrightarrow \psi(2S)\phi K^+$[4]. Первое обнаружение сигнала $B^0 \longrightarrow \psi(2S)\phi K_s^0$, полученное в данной работе, дает хорошие основания полагать, что за счет бóльшей статистики отобранные B^0 кандидаты могут быть эффективно использованы для поиска новых резонансных состояний в системах $\psi(2S)\phi$ и $\psi(2S)K_s^0$, что и является ближайшими планами авторов настоящей работы.

Литература

1. Review of Particle Properties / Particle Data Group [et al.]. // Phys. Rev. D. 2018. V. 98: 030001. DOI: 10.1103/PhysRevD.98.030001.
2. The CMS experiment at the CERN LHC / CMS Collaboration [et al.]. // JINST. 2008. V. 3: S08004. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004.

3. *Verkerke W., Kirkby D. P.* The RooFit toolkit for data modeling // eConf C. 2003. V.0303241: MOLT007. DOI: 10.48550/arXiv.physics/0306116.
4. Observation of the decay $B^+ \longrightarrow \psi(2S)\phi K^+$ in pp collisions at $\sqrt{s} = 8\ TeV$ / CMS Collaboration [et al.]. // Phys. Lett. B 2017. V. 764. P. 66–86. DOI: 10.1016/j.physletb.2016.11.001.

УДК 539.1.08

Разработка датчиков положения и фазы пучка для линейных резонансных ускорителей ионов

***В. Е. Амосова*[1,2], *С. А. Гаврилов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Линейные резонансные ускорители (линаки) ионов активно разрабатываются и используются как самостоятельные машины, так и в качестве начальных частей крупных сложносоставных ускорительных комплексов. Важной частью при разработке любого ускорителя является создание системы диагностики параметров пучка. При этом в линейных резонансных ускорителях особенно важны измерения равновесной фазы пучка для проведения процедуры продольного согласования ускоряющих секций (фазировки), а для измерения положения пучка рекомендуется использовать неразрушающую диагностику, позволяющую осуществлять непрерывный контроль на всем протяжении линака. Лучше всего для этих целей подходят емкостные датчики положения и фазы пучка [1, 2].

В работе проведено детальное моделирование датчика положения и фазы пучка (ДПП) полоскового типа (рис. 1) в ПО COMSOL Multiphysics.

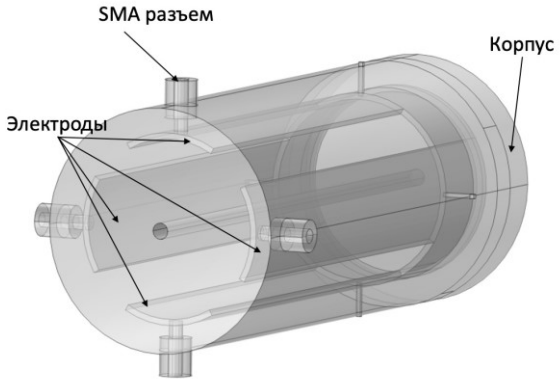
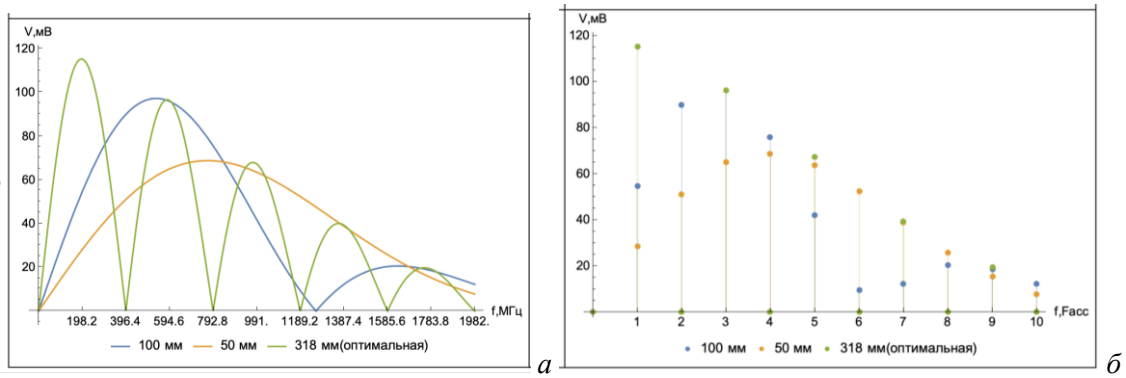


Рис. 1. Упрощенная геометрия полоскового датчика

При разработке датчика исследованы ключевые параметры, влияющие на определение положения и фазы: волновое сопротивление полосковой линии, амплитуда сигнала, диапазон линейности, чувствительность, точность и разрешение. На данные параметры влияет геометрия ДПП: угловой размер электродов, ширина зазора между электродами и корпусом, угловой размер электродов, апертура, параметры пучка: энергия E, длительность σ, импульсный ток I, частота следования сгустков F_{RF}, а также параметры считывающей электроники.

В первую очередь была оптимизирована геометрия ДПП. Ширина зазора между корпусом датчика и электродом определяет согласование полоскового электрода. Угловой размер подбирается на основе двух факторов: с ростом углов ого размера увеличивается амплитуда сигнала с датчика, но из-за взаимных связей между электродами уменьшается чувствительность. Длина электродов определяет амплитуду сигнала, выбор оптимальной длины зависит от параметров пучка, а также максимальная длина ограничивается необходимостью встраивания датчика в квадрупольные магниты. На основе численного моделирования приведены оценки типичных величин измеряемого сигнала полоскового датчика положения пучка в зависимости от геометрии датчика, амплитуды импульсного тока I и длительности сгустков детектируемого пучка σ. С помощью аналитического расчета получена зависимость сигнала от энергии E и оценена длина электрода, при которой достигается максимум сигнала l_{opt} (рис. 2). Проведенное моде-

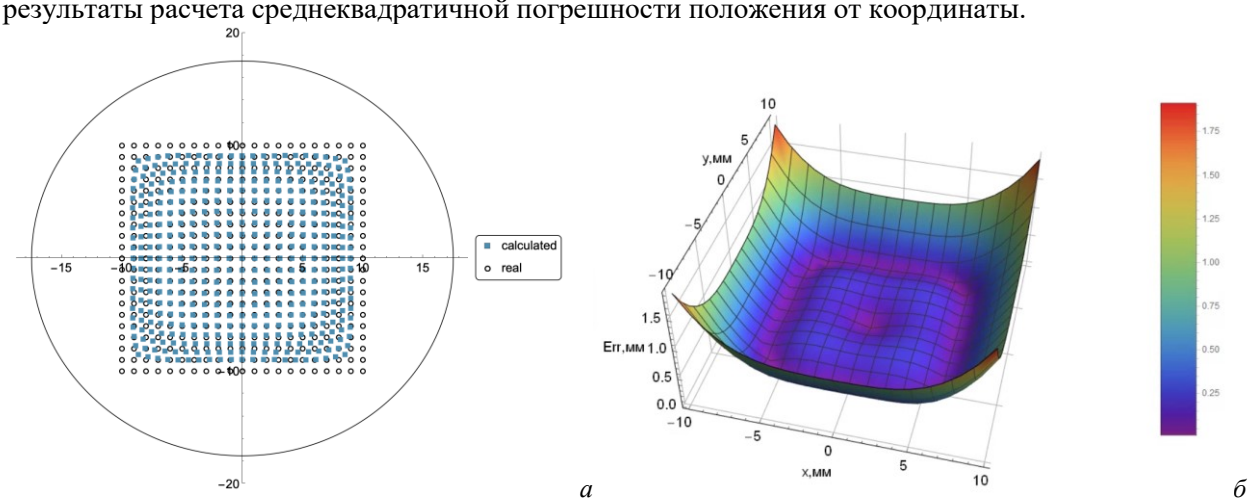
лирование позволило получить оценку максимального сигнала, создаваемого реальным пучком, что важно для оптимизации параметров предусилительной и регистрирующей электроники.



а *б*

Рис. 2. Зависимость напряжения на датчике от частоты при различных длинах электрода (*а*). Частотный спектр сигнала на гармониках ускоряющей частоты (*б*) для различных длин электродов, угловой размер 60 градусов, *E*=100 МэВ,$\sigma = 0.17$ нс, $l_{opt} = 318$ мм, $I = 10$ мА

После оптимизации геометрии ДПП были числено рассчитаны чувствительность, область линейности и точность для фиксированной геометрии. Для согласованного датчика с угловым размером 60 градусов, диаметром апертуры 44 мм чувствительность составила 6%/мм, область линейности — 36% апертуры, максимальная среднеквадратичная ошибка в области линейности — 2.5 %. На рис. 3 представлены результаты расчета среднеквадратичной погрешности положения от координаты.



а *б*

Рис. 3. Регистрируемые положения пучка в сравнении с заданными координатами в численной модели (*а*), погрешность в определении положения пучка (*б*)

Благодаря полученным результатам численного моделирования были сформулированы требования по оптимизации конструкций детектирующих узлов и разработаны трехмерные модели датчиков на основе стандартных вакуумных комплектующих (рис. 4).

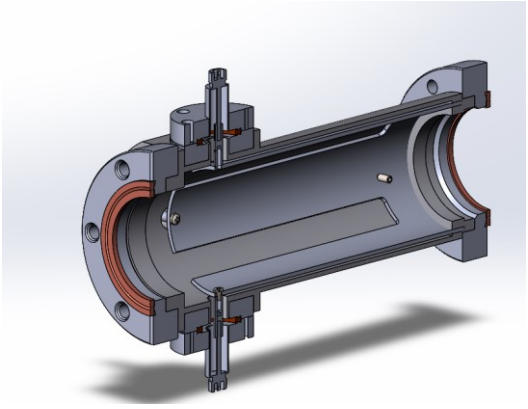


Рис. 4. 3D-модель полоскового датчика положения и фазы пучка

Литература

1. *Forck P.* Beam Instrumentation and Diagnostics // arXiv preprint. [2020]. arXiv: 2009.10411.
2. *Wendt M.* BPM systems: A brief introduction to beam position monitoring // arXiv preprint. [2020]. arXiv: 2005.14081.

УДК 524.1, 520.8

Поиск событий, индуцированных фотонами высоких энергий, в эксперименте по исследованию космических лучей Tunka-Grande

***В. В. Шлыков*[1,2], *И. В. Харук*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

В рамках современной астрофизики первичные космические лучи, являющиеся катализаторами формирования широких атмосферных ливней (ШАЛ), определяются как потоки высокоэнергетических заряженных частиц, включающих в себя протоны, α-частицы и более тяжелые ядра. В более широком контексте, данный ансамбль может быть дополнен электронами, позитронами, нейтрино и гамма-квантами. Важность изучения ШАЛ, индуцированных гамма-квантами высоких энергий, составляющих очень малую долю в общем спектре первичных космических лучей, обусловлена их потенциальной способностью предоставить новые данные для тестирования и верификации гипотез в области новой физики, включая теории аксионов, темной материи и нарушения Лоренц-инвариантности.

Основной целью настоящего исследования является установка верхнего ограничения на поток космического гамма-излучения в диапазоне энергий от 10^{16} до $10^{17,5}$ эВ — именно в данной части энергетического спектра Tunka-Grande способна детектировать фотонные космические лучи. В частности, стоит задача уточнения с помощью нейросетевых алгоритмов верхнего предела потока гамма-излучения для данной установки, полученного в работе [1] классическими методами анализа мюонной компоненты.

Экспериментальная установка для исследования космического излучения Tunka-Grande представляет собой массив сцинтилляционных счетчиков, объединенных в 19 станций и расположенных на площади ~ 0,5 км^2 [1]. Каждая станция состоит из двух частей: наземной и подземной. Первая регистрирует все заряженные частицы ШАЛ на уровне наблюдения, вторая расположена под слоем грунта 1,5 м и предназначена для выделения мюонной компоненты ШАЛ.

В рамках данного исследования в качестве данных для обучения нейронных сетей были применены результаты, полученные с использованием методов компьютерного моделирования широких атмосферных ливней (ШАЛ) коллаборацией TAIGA. Для симуляции отклика сцинтилляционных детекторов применялся метод Монте-Карло, реализованный в программных пакетах CORSIKA и Geant4. Данный набор данных включал в себя информацию о 10000 протонных и 10000 фотонных событиях. Так как все 19 станций состоят из наземной и подземной частей, для каждого из этих событий были зафиксированы 38 значений «зарядов» (где заряд — сигнал детектора, нормированный на минимально регистрируемое событие прилета вертикального мюона) и 38 значений расстояний от детекторов до оси ливня. Расчет расстояний осуществлялся на основе аналитических методов реконструкции оси ливня, учитывая расположение 19 наземных и 19 подземных детекторов.

Как демонстрируется на рис. 1, детекторы расположены в приближении к квадратной сетке, что обосновывает применение алгоритма сверточной нейронной сети для анализа данных. Преимущество данного подхода заключается в структурированном представлении данных, при котором сохраняется информация о пространственном расположении детекторов, способствуя корреляции сигналов соседних станций. Это хорошо демонстрируется в задачах классификации изображений, где сверточные нейронные сети демонстрируют повышенную точность в сравнении с полносвязными сетями за счет учета пространственных взаимосвязей между элементами данных.

Однако из-за того, что расположение станций на полученной сетке не формирует идеальный прямоугольник, было принято решение о дополнении массива данных шестью виртуальными станциями (по 3 на каждый из «срезанных» углов), создающими вместе с реальными детекторами сетку размером 5x5. Эти виртуальные станции для всех событий получили фиксированное относительно большое значение расстояния и фиксированное близкое к нулю значение заряда, что позволило сформировать набор данных в виде четырехканальных изображений размером 5x5 (по четыре канала на каждую станцию, соответствующих заряду и расстоянию для наземных и подземных детекторов). Последующее разделение

данных на обучающую и тестовую выборки позволило провести обучение и оценку эффективности различных моделей.

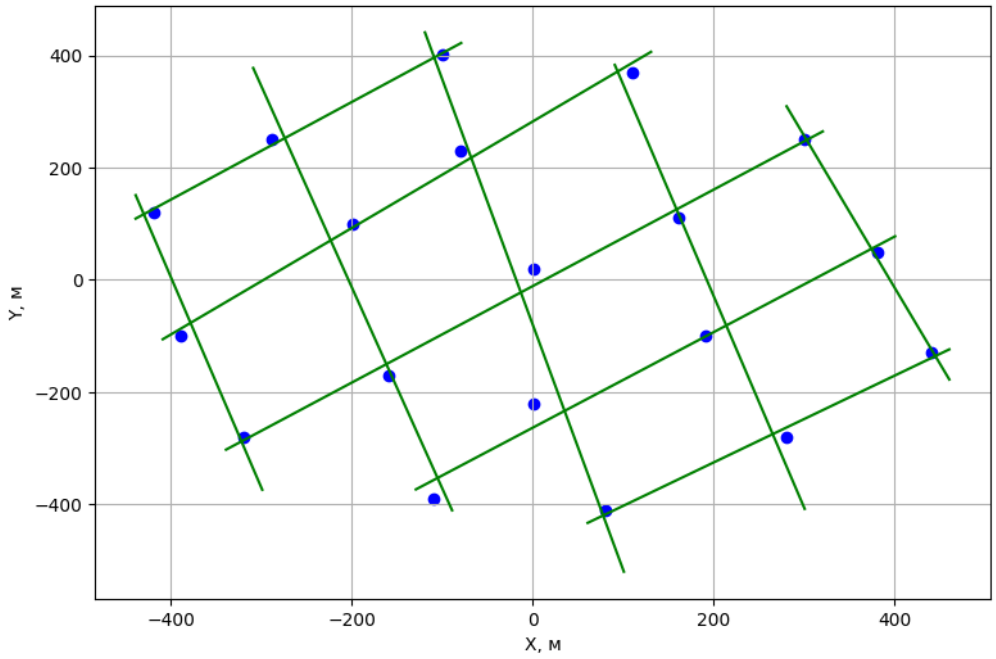


Рис. 1. Расположение детекторов установки Tunka-Grande

Первая архитектура нейронной сети, состоящая из трех сверточных и двух полносвязных слоев, демонстрировала точность классификации событий (различение протонных и гамма-событий) в диапазоне 96.5–96.9% на тестовой выборке. Однако наблюдалась тенденция к переобучению, проявляющаяся в увеличении разрыва между точностью на обучающей и тестовой выборках после приблизительно 15 эпох, что иллюстрируется на рис. 2 (модель № 1). В целях повышения точности классификации и снижения вероятности переобучения была оптимизирована архитектура сети за счет увеличения количества сверточных слоев при одновременном уменьшении размера полносвязных слоев, а также введения механизма регуляризации dropout [2] на всех уровнях сети. Учитывая относительно небольшой объем выборки данных, применение методов ансамблевой регуляризации, таких как dropout, является обоснованным. Модифицированная модель продемонстрировала улучшенную устойчивость к переобучению (см. модель № 2 на рис. 2) и повышенную точность (97.2–97.5%) на тестовой выборке.

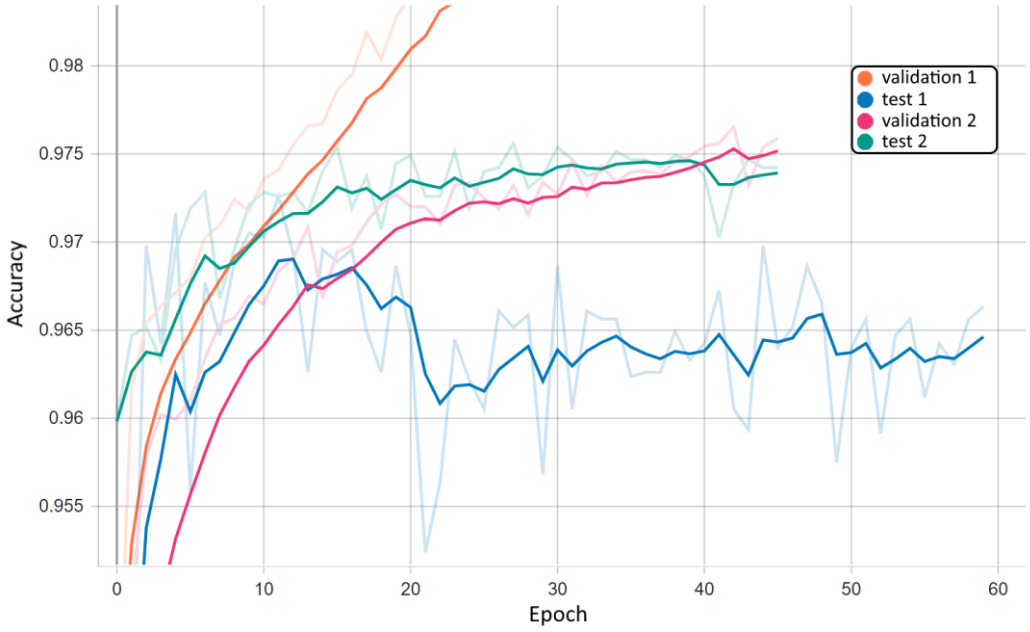


Рис. 2. График точности предсказаний в зависимости от эпохи обучения для двух моделей № 1, № 2.

Анализ распределения предсказаний последней модели, представленный на рис. 3 в логарифмическом масштабе, выявил ее тенденцию к категоричному классифицированию событий либо как протонные, либо как гамма-события, с минимальным количеством промежуточных значений. Значительное количество гамма-событий было ошибочно классифицировано с высокой уверенностью как протонные, что указывает на предрасположенность модели к выдаче крайних значений вероятности (близких к 0 или 1), что не является оптимальным в контексте задачи точного разграничения протонных и фотонных событий.

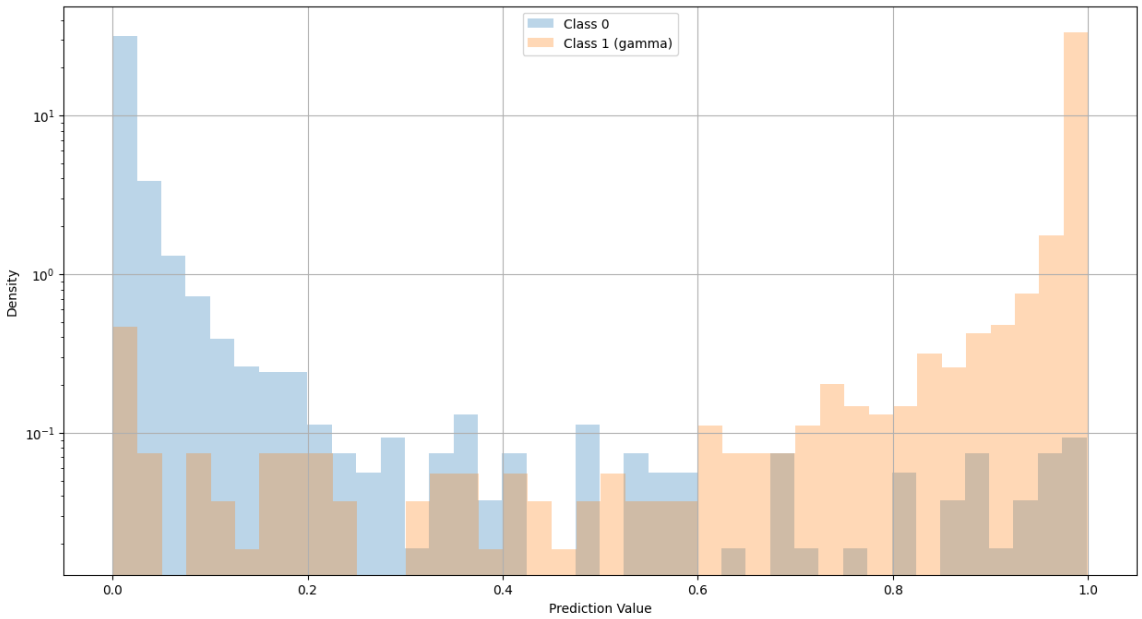


Рис. 3. Гистограмма предсказаний наилучшей модели в логарифмическом масштабе; оранжевым изображены предсказания, соответствующие гамма-событиям, синим — протонным событиям

В дальнейшем планируется усовершенствование модели путем оптимизации гиперпараметров и архитектуры с целью улучшения точности классификации. Для решения проблемы ошибочной классификации с высокой уверенностью предполагается применение альтернативных функций потерь, таких как Focal loss [3], которые уменьшают вклад в функцию потерь хорошо классифицируемых событий, обращая больше внимания на трудно классифицируемые примеры. Это, в сочетании с высокой точностью алгоритма, позволит при анализе реальных экспериментальных данных эксперимента Tunka-Grande установить наиболее актуальные ограничения на поток космического гамма-излучения в диапазоне энергий от 10^{16} до $10^{17{,}5}$ эВ.

Литература

1. *Монхоев Р. Д.* [и др.]. Основные результаты эксперимента Tunka-Grande // Письма в ЭЧАЯ. 2023. Т. 20. № 5(250). С. 1117–1136.
2. *Srivastava N.* [et al.]. Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting // Journal of Machine Learning Research. 2014. V. 15(1). P. 1929–1958.
3. *Lin T. -Y.* [et al.]. Focal Loss for Dense Object Detection // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2020. V. 42(2). P. 318–327.

УДК 539.126.4

Поиск CP-нарушений в распадах D^0-мезонов в эксперименте CMS

***В. С. Сергейчик*[1], *С. М. Поликарпов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[3]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Неинвариантность фундаментальных взаимодействий относительно комбинированных зарядовой и пространственной четности (CP) является одним из необходимых условий для генерации наблюдаемой

барионной асимметрии Вселенной [1]. В Стандартной модели CP-нарушения в распадах частиц возникают за счет наличия комплексной фазы в параметризации CKM-матрицы смешивания кварков [2]. Нарушение CP-инвариантности хорошо измерено в распадах мезонов, содержащих нижние кварки (b и s), и экспериментальные данные согласуются с теоретическими расчетами Стандартной модели [3]. Современная теория предсказывает значительное подавление CP-нарушающих эффектов в распадах D^0-мезонов (мезонов с верхним, c-кварком), однако в канале $D^0 \to K^0_S K^0_S$, согласно теоретическим расчетам [4], эти эффекты могут иметь порядок 1%, что значительно больше, чем в других модах распада D^0, тем самым этот канал является наиболее перспективным для поисков CP-нарушений в распадах очарованных мезонов. Если удастся обнаружить значительное отклонение эксперимента от предсказаний теорией, то данное наблюдение будет свидетельствовать о присутствии «Новой физики» в данном процессе.

В настоящей работе представлены результаты по изучению нарушения CP-симметрии в распадах $D^0 \to K^0_S K^0_S$. Данные были взяты из эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере. Запись данных происходила в течение 2018 года. В этом году использовался новый набор триггеров на мюоны с разными порогами на поперечный импульс и прицельный параметр. Благодаря этим требованиям удалось отобрать порядка $O(10^{10})$ событий, содержащих очарованный кварк, что хорошо подходит для измерения CP-нарушений, требующего большой статистической точности. Объектом исследования является величина $A_{CP}(D^0 \to K^0_S K^0_S)$, определяемая формулой:

$$A_{CP} = \frac{\Gamma(D^0 \to K^0_S K^0_S) - \Gamma(\overline{D^0} \to K^0_S K^0_S)}{\Gamma(D^0 \to K^0_S K^0_S) + \Gamma(\overline{D^0} \to K^0_S K^0_S)} \quad (1)$$

здесь Γ — ширина распада D^0-мезона. Чтобы различать события с D^0 и $\overline{D^0}$ накладывается дополнительное требование: D^0-мезоны должны рождаться в распадах $D^{*\pm}(2010) \to D^0(\overline{D^0})\pi^{\pm}$. Таким образом, по заряду пиона можно различать события с D^0-мезонами и $\overline{D^0}$-мезонами. Прямое измерение A_{CP} сопряженно с трудностями, вызванными сложностями измерения асимметрий эффективности реконструкции $D^{*\pm}(2010)$ и сечения рождения $D^{*\pm}(2010)$. Избежать этого позволяет рассмотрение разницы параметров A_{CP} достаточно похожих каналов распада. Таким образом, в данном анализе рассматривается ΔA_{CP} между каналами $D^0 \to K^0_S K^0_S$ и $D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-$: их топология и кинематика очень близки, что делает асимметрии реконструкции и рождения в этих распадах одинаковыми, а при рассмотрении разницы они сокращаются, приводя к измерению величины, зависящей исключительно от статистики:

$$\Delta A^{CP} = A^{CP\ raw}(D^0 \to K^0_S K^0_S) - A^{CP\ raw}(D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-), \quad (2)$$

$$A^{CP\ raw}(D^0 \to K^0_S K^0_S) = \frac{N(D^{*+}(2010) \to D^0 \pi^+ \to K^0_S K^0_S \pi^+) - N(D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S K^0_S \pi^-)}{N(D^{*+}(2010) \to D^0 \pi^+ \to K^0_S K^0_S \pi^+) + N(D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S K^0_S \pi^-)} \quad (3)$$

$$A^{CP\ raw}(D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-) = \frac{N(D^{*+}(2010) \to D^0 \pi^+ \to K^0_S \pi^+ \pi^- \pi^+) - N(D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S \pi^+ \pi^- \pi^-)}{N(D^{*+}(2010) \to D^0 \pi^+ \to K^0_S \pi^+ \pi^- \pi^+) + N(D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S \pi^+ \pi^- \pi^-)} \quad (4)$$

Для достижения наибольшей возможной статистической точности были оптимизированы критерии отбора событий в каналах $D^0 \to K^0_S K^0_S$ и $D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-$. Были исследованы систематические ошибки вычисления, а также была достигнута наиболее удачная аппроксимация инвариантной массы продуктов распада D^0 и $D^{*\pm}(2010)$. В итоге удалось извлечь число кандидатов в изучаемые процессы и измерить величину ΔA_{CP} [6].

На рис. 1 изображены распределения инвариантных масс продуктов распада $D^{*\pm}$ в каналах $D^{*+}(2010) \to D^0 \pi^+ \to K^0_S K^0_S \pi^+$ (слева) и $D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S K^0_S \pi^-$ (справа). Из графиков хорошо видна асимметрия числа кандидатов в события с D^0 и $\overline{D^0}$ (показано голубой штрихованной линией).

В результате этого исследования было получено значение разности параметров CP-нарушения [6] в распадах $D^0 \to K^0_S K^0_S$ и $D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-$:

$$\Delta A_{CP} = (6.3 \pm 3.0\ (\text{stat}) \pm 0.2\ (\text{syst}))\ \%$$

Используя значение для $A_{CP}(D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-)$ [5], полученное значение для $A_{CP}(D^0 \to K^0_S K^0_S)$:

$$A_{CP}(D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-) = (6.2 \pm 3.0\ (\text{stat}) \pm 0.2\ (\text{syst}) \pm 0.8\ (A_{CP}(D^0 \to K^0_S \pi^+ \pi^-)))\ \%$$

Данное измерение [6] свидетельствует об отсутствии CP-нарушений в распаде $D^0 \to K^0_S K^0_S$, поскольку центральное значение A_{CP} отличается от 0 на два стандартных отклонения. Это первое измерение нарушения CP-симметрии в очарованных мезонах на детекторе CMS, открывающее новое направление для исследований в этом эксперименте.

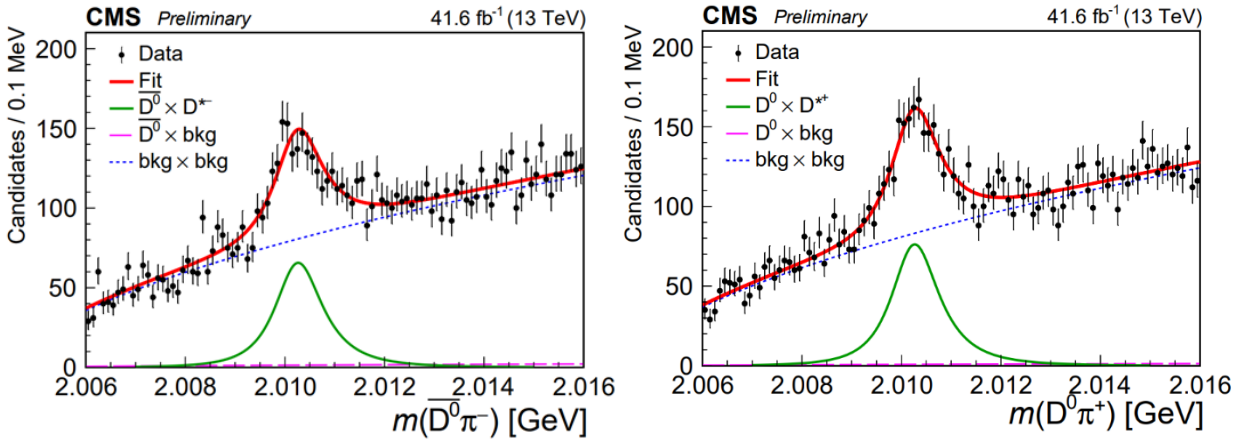


Рис. 1. Распределения инвариантных масс продуктов распада $D^{*\pm}$ в каналах $D^{*+}(2010) \to D^0\pi^+ \to K^0_S K^0_S \pi^+$ (слева) и $D^{*-}(2010) \to \overline{D^0}\pi^- \to K^0_S K^0_S \pi^-$ (справа). Горизонтальные штриховые голубые линии показывают разницу числа кандидатов в исследуемые процессы

Литература

1. *Сахаров А. Д.* Нарушение CP-инвариантности. C-асимметрия и барионная асимметрия Вселенной // Письма ЖЭТФ. 1967. Т. 5. № 1. С. 32–35.
2. *Kobayashi M., Maskawa T.* CP-violation in the renormalizable theory of weak interaction // Prog. Theor. Phys. 1973. V. 49(2). P. 652–657.
3. Observation of large CP-violation in the neutral B meson system / The Belle Collaboration // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87(9): 091802.
4. *Nierste U., Schacht S.* CP violation in $D^0 \to K^0_S K^0_S$ // Phys. Rev. D. 2015. V. 92(5): 054036.
5. Review of particle physics / Particle Data Group Collaboration // PTEP. 2022. V. 2022(8): 083C01.
6. Search for CP violation in D0 → K0 SK0 S decays using pp collisions at 13 TeV / The CMS Collaboration // CMS-PAS-BPH-23-005. URL: https://cms-results.web.cern.ch/cms-results/public-results/preliminary results/BPH-23-005 (дата обращения: 13.05.2024).

УДК 539.120.7

Увеличение эффективности отбора продуктов реакций мюонных нейтрино в ближнем детекторе ускорительного эксперимента T2K

***Д. В. Федорова*[1,2], *А. О. Измайлов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Проект T2K [1, 2] — ускорительный нейтринный эксперимент с длинной базой, основной задачей которого является прецизионное измерение параметров осцилляций нейтрино. В состав T2K входит ускорительный комплекс J-PARC, ближний нейтринный детектор ND280 и дальний Черенковский детектор Super-Kamiokande (рис. 1).

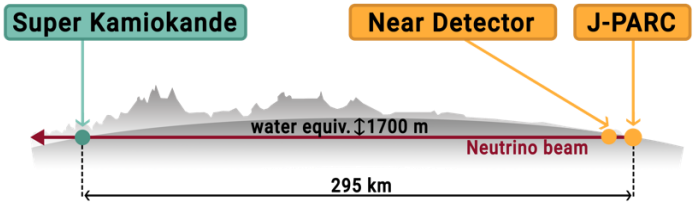


Рис. 8. Схема эксперимента T2K

Использование данных ближнего детектора ND280 необходимо для определения параметров сечения взаимодействия и потока нейтрино до осцилляций. Эти измерения играют важную роль в снижении систематических ошибок и увеличении точности анализа в дальнем детекторе (рис. 2).

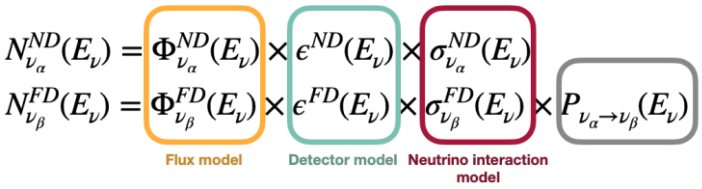


Рис. 2. Зависимость числа частиц в ближнем и дальнем детекторах от параметров модели

Существенным ограничением является относительно малое фазовое пространство, доступное для проведения измерений в ND280. В предыдущих версиях анализа в ближнем детекторе отбирались только треки, летящие под малым углом по отношению к оси пучка, в то время как в дальнем детекторе Super-Kamiokande, благодаря его симметричной геометрии, ограничений по углу не было. Выделение треков во всем телесном угле позволит более эффективно сравнивать данные ближнего и дальнего детекторов.

Представляемая работа посвящена использованию новых методов восстановления и отбора продуктов нейтринных реакций, что позволяет значительно расширить кинематический диапазон анализа.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-12-00358.

Литература

1. *Abe K.* [et al.]. The T2K experiment // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2011. V. 659(1). P. 106–135.
2. *Abe K.* [et al.]. Constraint on the matter–antimatter symmetry-violating phase in neutrino oscillations // Nature. 2020. 580(7803). P. 339–344

УДК 53.087.45

Разработка интегрирующего датчика тока электронных пучков пикосекундной длительности

***И. И. Полоник*[1,2], *С. А. Гаврилов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Импульсный ток является одним из ключевых параметров пучка для диагностики в ускорителях заряженных частиц. В большинстве случаев он измеряется неразрушающим способом с помощью индукционных датчиков тока (ИДТ), однако при измерениях коротких импульсов (<1 нс) полоса пропускания таких устройств оказывается недостаточной, для того чтобы обеспечить регистрацию формы и длительности импульса тока пучка [1]. В этих случаях переходят к интегрирующим ИДТ (И-ИДТ), позволяющим измерять интегральный заряд в импульсе, а длительность импульса однозначно определяется параметрами инжектора частиц, например, длительностью лазерного импульса в электронных пушках с фотокатодом. Принцип работы И-ИДТ (рис. 1) основан на том, что токи изображения импульса пучка, текущие по проводящему корпусу, заряжают интегрирующий конденсатор, который затем разряжается за время, существенно превышающее длительность первичного импульса, и этот вторичный сигнал может быть легко зарегистрирован стандартным ИДТ, находящимся внутри корпуса. Длительность и форма вторичного сигнала при этом не зависят от параметров первичного импульса и определяются исключительно параметрами такой сборки, играющей роль колебательного контура, а амплитуда регистрируемого сигнала изменяется пропорционально заряду импульса. Таким образом, после соответствующей калибровки, например, с помощью цилиндра Фарадея, датчик может использоваться для абсолютных неразрушающих измерений заряда ультракоротких импульсов.

В данной работе представлено описание процесса предварительной разработки И-ИДТ на стадии тестового макета для пучка электронной фотопушки с номинальной длительностью импульса 1 пс и импульсным зарядом 100 пКл.

Тестовый макет И-ИДТ был собран на основе двух ферритовых колец с магнитной проницаемостью ~2500 (активного с сигнальной обмоткой и пассивного), помещенных в медный корпус с закороткой через группу симметрично припаянных конденсаторов общей емкостью 15 нФ (рис. 2). На рис. 3 представлен отклик макета на импульсный ток длительностью 1 нс и амплитудой 160 мА в сравнении с результатом моделирования в ПО COMSOL Multiphysics на основе анализа эквивалентной электрической

цепи [2] с учетом пассивного ферритового сердечника, играющего роль вспомогательной индуктивности и фильтра высоких частот. Также было проведено моделирование распределения магнитного поля внутри И-ИДТ и плотности токов изображения, текущих по корпусу датчика в момент зарядки системы при прохождении первичного импульса тока.

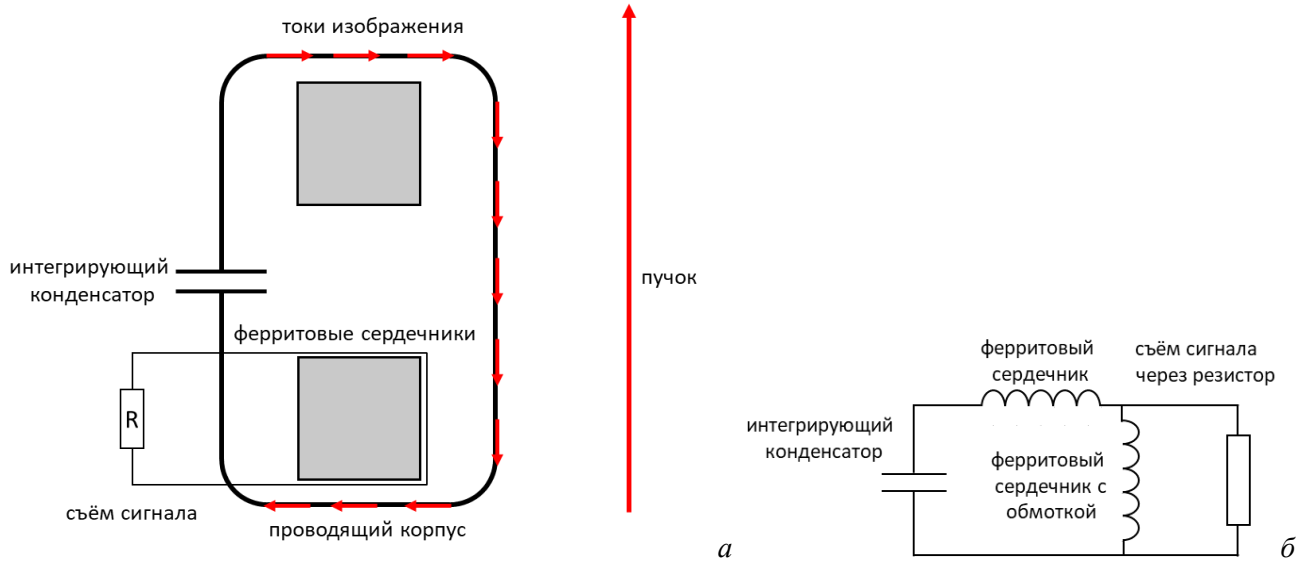


Рис. 1. Схематичное устройство И-ИДТ (*а*); эквивалентная схема И-ИДТ (*б*)



Рис. 2. Тестовый макет И-ИДТ

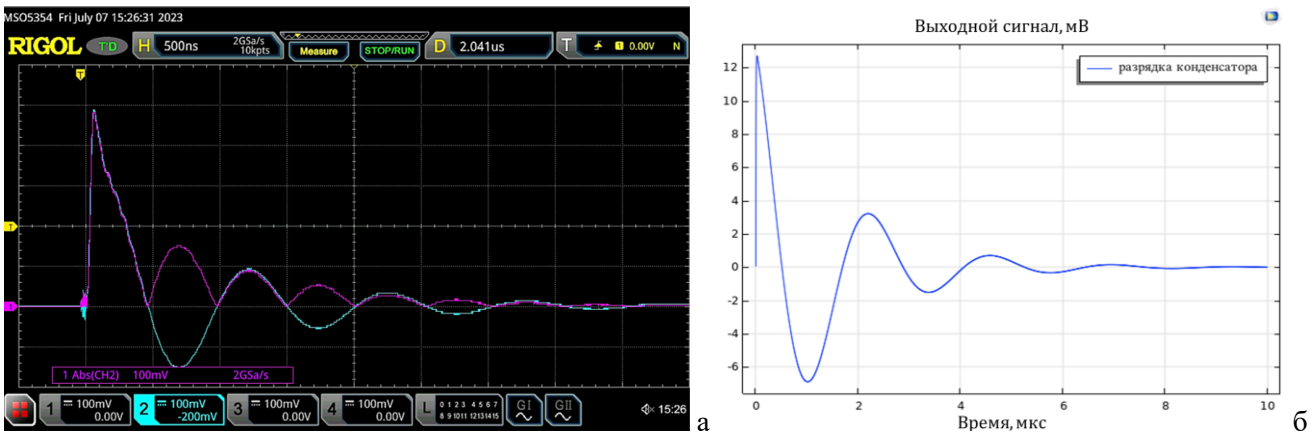


Рис. 3. Измеренный сигнал, формируемый макетом И-ИДТ в качестве отклика на первичный токовый импульс длительностью 1 нс (*а*) и аналогичный сигнал, полученный в результате моделирования (*б*)

Литература

1. *Wu Y.* [et al.] A new method to calculate the beam charge for an integrating current transformer // Rev. Sci. Instrum. 2012. V. 83(9): 093302.
2. *Unser K. B.* Design and preliminary tests of a beam intensity monitor for LEP // Proceedings of the 1989 IEEE Particle Accelerator Conference, Accelerator Science and Technology. 1989. P. 71–73.

УДК 538.97

Моделирование нейтроноводного канала импульсного источника РАДЭКС

***Д. А. Бучный*[1,2], *В. С. Литвин*[1,3], *Д. Н. Трунов*[1], *Р. А. Садыков*[1]**

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
[3]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

В ИЯИ РАН на базе линейного ускорителя протонов сооружен импульсный источник нейтронов, использующий реакции скалывания (spallation), РАДЭКС [1]. Замедлитель нейтронов источника расположен перпендикулярно протонному пучку, подаваемому на вольфрамовую мишень, что обеспечивает сравнительно высокий выход нейтронов, приходящихся на один протон. Первая часть канала источника диаметром 100 мм переносит нейтроны от замедлителя через слой биологической защиты на расстояние 4 м. Далее нейтроны распространяются по трубе диаметра 200 мм, увеличивая пролетную базу на 5–23 м (рис. 1). Спектр источника обогащен эпитепловыми нейтронами, необходимыми для дифракции на сильно поглощающих нейтроны веществах, например содержащих Gd.

В настоящее время ведется разработка нового порошкового времяпролетного нейтронного дифрактометра, который планируется установить на одном из каналов источника [2]. Стоит отметить, что поскольку горизонтальные каналы доставки нейтронов источника РАДЭКС составляют с осью протонного пучка линейного ускорителя угол не более 5 град, источник характеризуются повышенным гамма-фоном и фоном быстрых нейтронов при малых пролетных базах, что затрудняет работу с экспериментальными установками. Кроме того, увеличение пролетной базы ведет к повышению разрешения дифрактометра без сокращения длительности импульса нейтронов. Следовательно, улучшением дифрактометра является увеличение пролетной базы и установка нейтроновода, который, работая для тепловых нейтронов как оптоволокно, «приближает» дифрактометр к источнику нейтронов, сохраняя при этом невысокий фон гамма-излучения и быстрых нейтронов.

В этой работе методами Монте-Карло трассировки нейтронных траекторий [3] был проведен анализ прохождения нейтронного пучка источника РАДЭКС от замедлителя к узлу образца при различных конфигурациях нейтроноводной системы установки. При моделировании использована пролетная база длиной 29.4 м, которой соответствуют нейтроноводный сегмент длиной 5–23 м. Рассмотрены линейный нейтроновод и трапециевидный нейтроновод-концентратор с квадратным поперечным сечением. В случае линейного нейтроновода сечение составляло 20x20 мм, что соответствует типичному размеру образца для нейтронной дифрактометрии. Для нейтроновода-концентратора при размере сечения на выходе 20x20 мм были рассмотрены сечения на входе 100x100 мм, 70x70 мм и 40x40 мм, в различной степени охватывающие выходное окно вакуумного канала (3) на рис. 1. На рис. 2 приведены графики спектрального переноса нейтронов при различных конфигурациях нейтроноводной системы в сравнении со случаем, когда нейтроновод в сегменте (4) на рис. 1 отсутствует и заменен на щель-диафрагму 20x20 мм на выходе канала. Во всех нейтроноводах использовались нейтронные суперзеркала с показателем отражения нейтронов m=2 и m=3.

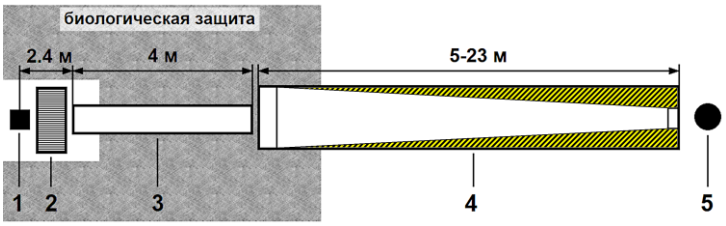


Рис. 1. Система транспортировки нейтронов источника РАДЭКС: *1* — вольфрамовая мишень; *2* — водяной замедлитель нейтронов; *3* — вакуумный канал диаметром 100 мм; *4* — вакуумный канал квадратного сечения со стороной 200 мм; в который установлен нейтроновод-концентратор; *5* — образец

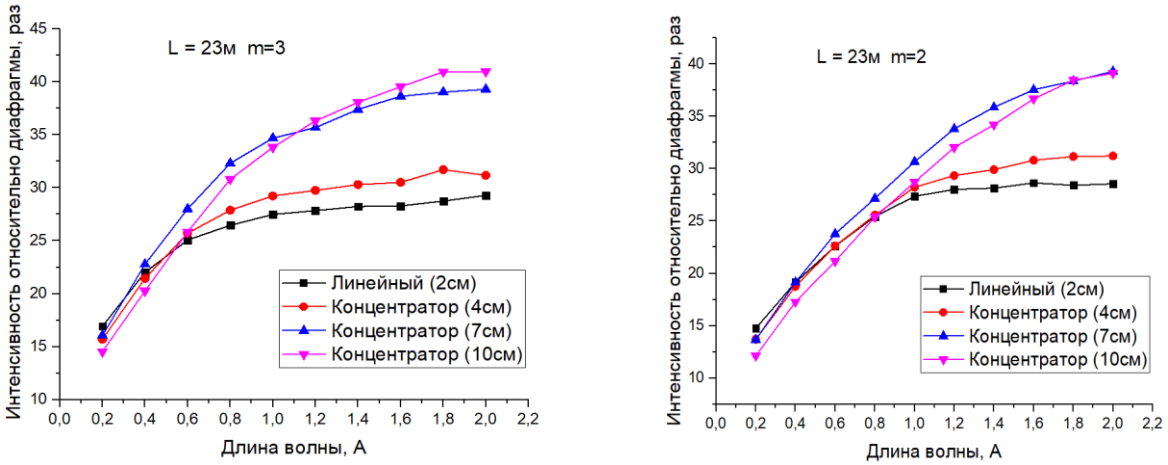


Рис. 2. Выигрыш в интенсивности нейтронов при пролетной базе установки 23 м для линейного нейтроновода и трапецевидного нейтроновода-концентратора в сравнении с переносом через щель-диафрагму перед образцом. Нейтроноводы составлены из суперзеркал с показателем m=2 (слева) и m=3 (справа)

Использование нейтроноводов позволяет получить выигрыш в интенсивности до 40 раз при длине волны нейтрона 2А. Из полученных зависимостей для m=2 и m=3 видно, что преимущество в интенсивности для нейтроноводов из суперзеркал с m=3 невелико и в данном случае не оправдывает разности в доступности по сравнению с зеркалами m=2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-10-2021-115 от 15.11.21, идентификационный номер проекта 000000S507521RGN002), в рамках совместной исследовательской программы «Разработка и создание современных экспериментальных станций источников импульсного или постоянного типа».

Литература

1. *Литвин В. С.* [и др]. Нейтронная дифракция и спектрометрия на импульсном нейтронном источнике «РАДЭКС» ИЯИ РАН // Поверхность. 2019. № 3. С. 25–31.
2. *Бучный Д. А.* [и др]. Моделирование эффективности и разрешения регистрации нейтронов сцинтилляционным счетчиком на базе ZnS(Ag):^{6}LiF // Поверхность. 2022. № 12. С. 38–47.
3. *Kanaki K.* [et al]. Simulation tools for detector and instrument design // Physica B: Condensed Matter. 2018. V. 551. P. 386–389.

УДК 539.126.6

Обнаружение распада $\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-$ и изучение Ξ_b^{*0} бариона в эксперименте CMS

К. М. Иванов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Семейство Ξ_b барионов представляет изодублеты, состоящие из bsq кварков, где q является up или down кварком для Ξ_b^0 и Ξ_b^- состояний, соответственно. В настоящее время обнаружено [1] довольно мало распадов этих частиц (по сравнению с, например, прелестными мезонами).

Кварковая модель предсказывает существование трех изодублетов, не являющихся орбитальными или радиальными возбуждениями — Ξ_b со спин-четностью $J^P = 1/2^+$ и орбитальным моментом легкого дикварка $j_{qs} = 0$, $\Xi_b{}'$ с $J^P = 1/2^+$ и $j_{qs} = 1$ и Ξ_b^* с $J^P = 3/2^+$ и $j_{qs} = 1$. Следующие очевидные изодублеты, в соответствии с аналогами в секторе очарованных барионов, это орбитально возбужденные P-волновые Ξ_b^{**} резонансы с $J^P = 1/2^-$ и $3/2^-$. Изучение спектроскопии этих частиц, обнаружение новых состояний и точные измерения параметров и распадов, существующих является предметом активного изучения на БАК в настоящее время в экспериментах LHCb и CMS.

Три состояния с $j_{qs} = 1$ были ранее обнаружены на БАКе коллаборациями CMS [2] и LHCb [3,4] в распадах на $\Xi_b^-\pi^+$ или $\Xi_b^0\pi^-$, в то время как четвертое, $\Xi_b^{\prime 0}$, не обнаружено в сильном распаде, т.к. его

масса ожидается быть легче порога $\Xi_b\pi$. Аналогично, 3 P-волновых Ξ_b^{**} состояния, распадающихся на $\Xi_b^{*0}\pi^-$, $\Xi_b^{*-}\pi^+$ и $\Xi_b^{\prime-}\pi^+$, также были обнаружены в 2021–2023 гг. на CMS [5] и LHCb [6].

В настоящей работе [7] представлены результаты по первому обнаружению нового распада основного состояния $\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-$ и изучению возбужденного состояния Ξ_b^{*0} бариона в распаде на $\Xi_b^-\pi^+$, где Ξ_b^- восстанавливается в распадах $J/\psi\Xi^-$, $\psi(2S)\Xi^-$ и $J/\psi\Lambda K^-$, где в последнем конечном состоянии присутствует сигнал от частично-восстановленной компоненты $J/\psi\Sigma^0K^-$ (мягкий фотон из распада $\Sigma^0 \to \Lambda\gamma$ не реконструирован). Для проведения настоящих исследований нами были использованы данные, набранные экспериментом CMS [8] на БАК в pp-столкновениях с энергией в системе центра масс $\sqrt{s} = 13\,ТэВ$ в 2016-2018 годах, соответствующие интегральной светимости $140\,фб^{-1}$.

Для реконструкции изучаемых распадов сначала восстанавливались состояния чармония (J/ψ и $\psi(2S)$) по димюонным распадам, являющиеся основными триггерными событиями для изучения прелестной физики на CMS. Также $\psi(2S)$ изучался в моде $J/\psi\pi^+\pi^-$. Далее добавлялся так называемый $V0$-кандидат, т.е. Λ-гиперон, распадающийся на $p\pi^-$. На следующем этапе добавляется заряженный трек с массовой гипотезой пиона или каона. В случае пиона формируется вершина $\Xi^- \to \Lambda\pi^-$. Для восстановления Ξ_b^- проводится кинематический вершинный фит мюонов и Ξ^- или каона для мод распада $\psi\Xi^-$ и $J/\psi\Lambda K^-$, соответственно. Для изучения возбуждения $\Xi_b^{*0} \to \Xi_b^-\pi^+$ отбирается очень мягкий пион из первичной вершины pp-столкновений. Для улучшения разрешения проводится процедура повторного кинематического фитирования первичной вершины.

На рис. 1 (слева) представлено полученное распределение по инвариантной массе $\psi(2S)\Xi^-$, где пик на 5.8 ГэВ соответствует сигналу от нового, ранее не обнаруженного распада Ξ_b^- бариона. В результате аппроксимации сигнала двойной функцией Гаусса, а фона — полиномом 1-й степени, локальная статистическая значимость сигнала, вычисленная методом разницы функций наибольшего правдоподобия, была оценена как значительно большая 5 стандартных отклонений, что свидетельствует о первом обнаружении нового распада. Была измерена его относительная вероятность (branching fraction) по сравнению с известным распадом $\Xi_b^- \to J/\psi\Xi^-$:

$$R = \frac{\mathcal{B}(\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-)}{\mathcal{B}(\Xi_b^- \to J/\psi\Xi^-)} = \frac{N_{\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-}}{N_{\Xi_b^- \to J/\psi\Xi^-}} \cdot \frac{\epsilon_{\Xi_b^- \to J/\psi\Xi^-}}{\epsilon_{\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-}} \cdot \frac{\mathcal{B}(J/\psi \to \mu^+\mu^-)}{\mathcal{B}(\psi(2S) \to \mu^+\mu^-)} = 0.84^{+0.21}_{-0.19} \pm 0.10 \pm 0.02.$$

Для изучения свойств Ξ_b^{*0}, было проведено изучение различных инвариантных масс $\Xi_b^-\pi^+$ для четырех возможных мод распада Ξ_b^-, как было сказано выше. На рис. 2 (справа) представлено одно из этих четырех распределений, для канала $\Xi_b^- \to J/\psi\Xi^-$, для переменой по разнице инвариантных масс $\Delta M = M(\Xi_b^-\pi^+) - M(\Xi_b^-) - m_{\pi^+}^{PDG}$. Во всех модах сигнал $\Xi_b^{*0} \to \Xi_b^-\pi^+$ представляет из себя узкий пик вблизи кинематического порта. Была проведена одновременная (simultaneous) аппроксимация двух наборов данных. Сигнал описан сверткой релятивистской функции Брейта–Вигнера и гауссового разрешения (зафиксировано из симуляции), где масса и ширина резонанса — общие параметры в одновременной аппроксимации. Фон моделируется пороговой функцией $(\Delta M)^\alpha$.

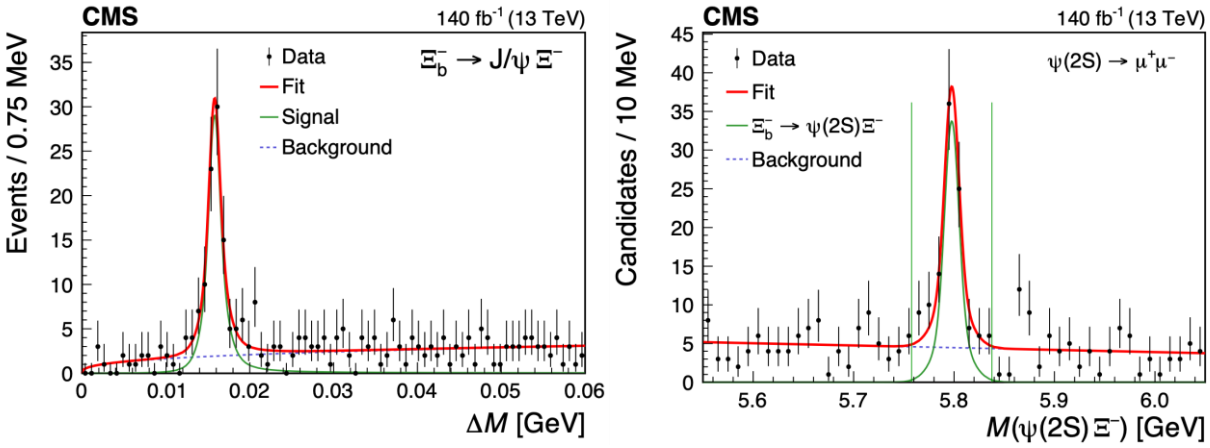


Рис. 2. Распределения по инвариантной массе $\psi(2S)\Xi^-$ (*слева*) и разнице инвариантных масс ΔM для отобранных $\Xi_b^-\pi^+$ кандидатов, где Ξ_b^- восстановлен в канале $J/\psi\Xi^-$ (*справа*). Также на данные наложены результаты аппроксимации

В результате аппроксимации были измерены с высокой точностью масса $M(\Xi_b^{*0}) = 5952.4 \pm 0.1 \pm 0.6$ МэВ (где последняя ошибка связана с неточность знания массы Ξ_b^-) и естественная ширина

$\Gamma(\Xi_b^{*0}) = 0.87^{+0.22}_{-0.20} \pm 0.16$ МэВ. Также было измерено отношение вероятностей рождения Ξ_b^{*0} и Ξ_b^- в pp-столкновениях на CMS:

$$R_{\Xi_b^{*0}} = \frac{\sigma(pp \to \Xi_b^{*0} X) \cdot \mathcal{B}(\Xi_b^{*0} \to \Xi_b^- \pi^+)}{\sigma(pp \to \Xi_b^- X)} = \frac{N(\Xi_b^{*0})}{N(\Xi_b^-)} \cdot \frac{\epsilon_{\Xi_b^-}}{\epsilon_{\Xi_b^{*0}}} = 0.23 \pm 0.04 \pm 0.02.$$

Результаты этих измерений находятся в отличном согласии с результатами предыдущих работ CMS и LHCb.

Представленные в работе результаты существенно углубляют наше понимание различных свойств Ξ_b барионов и помогают построить надежную теоретическую модель для единого и непротиворечивого описания физики тяжелых адронов, их распадов и процессов, связанных с формированием адронов из кварков.

Литература

1. Review of particle physics / Particle Data Group [et al.] // PTEP. 2022. V. 2022: 083C01. DOI: 10.1093/ptep/ptac097.
2. Observation of a new Ξ_b baryon / CMS Collaboration // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108: 252002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.252002.
3. Observation of two new Ξ_b^- resonances / LHCb Collaboration // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 114: 062004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.062004.
4. Measurement of the properties of the Ξ_b^{*0} baryon / LHCb Collaboration // JHEP. 2016. V. 05: 161. DOI: 10.1007/JHEP05(2016)161.
5. Observation of a new excited beauty strange baryon decaying to $\Xi_b^- \pi^+ \pi^-$ / CMS Collaboration // Phys. Rev. Lett. 2021. V. 126: 252003. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.252003.
6. Observation of new baryons in the $\Xi_b^- \pi^+ \pi^-$ and $\Xi_b^0 \pi^+ \pi^-$ systems / LHCb Collaboration // Phys. Rev. Lett. 2023. V. 131: 171901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.131.171901.
7. Observation of the $\Xi_b^- \to \psi(2S)\Xi^-$ decay and studies of the Ξ_b^{*0} baryon in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV / CMS Collaboration // arXiv preprint. [2024]. arXiv: 2402.17738.
8. The CMS experiment at the CERN LHC / CMS Collaboration // JINST. 2008. V. 3: S08004. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004.

УДК 533.922

Применение классификации и регрессии для анализа данных эксперимента по поиску 2К-захвата Xe-124

К. А. Сегал

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В лаборатории низкофоновых исследований Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН, начиная с 2014 года, идет эксперимент по поиску 2К-захвата в ^{124}Xe [1,3]. Для поиска данного процесса используется медный пропорциональный счетчик (МПС) высокого давления, с рабочим объемом 8,77 л, который окружен низкофоновой защитой, состоящей из 18 см меди, 15 см свинца и 8 см борированного полиэтилена. Установка находится в подземной низкофоновой лаборатории НЛГЗ-4900, расположенной на глубине 4900 м. в. э. [2]. Детектор заполнен ксеноном до давления 5,8 атм, с обогащением по ^{124}Xe равным 21%.

В случае 2К-захвата ^{124}Xe образуется атом ^{124}Te с двумя вакансиями на К-оболочке. При заполнении данных вакансий электронами с вышележащих оболочек (M, L) излишек энергии может быть испущен как в виде Оже-электронов, так и характеристических фотонов, со следующими вероятностями: 2% — только Оже-электроны, 24,6% — Оже-электроны и характеристический фотон, 73,4% - два характеристических фотона и Оже-электрон малой энергии. В случае, когда оба характеристических фотона поглощаются в рабочем объеме счетчика, то полное энерговыделение будет распределено в трех локальных кластерах (трехточечное событие). Сигналы от таких событий, обладающих рядом особых характеристик, являются объектом исследования в данной работе.

Вследствие конечного разрешения детектора и рекомбинации пар ионов в кластерах многоточечных событий, при движении к анодной нити (в область газового усиления), возможно слияние отдельных кластеров внутри единичного события, что может привести к неверной интерпретации класса события (одноточечное, двухточечное, трехточечное и т. д.). Для увеличения эффективности разделения сигналов МПС по классу предлагается использовать методы машинного обучения, при помощи которых с некоторой надежностью можно определить истинное количество кластеров в каждом событии детектора.

В настоящей работе предлагается два разных метода: классификация и регрессия. Оба метода направлены на то, чтобы определить класс события по задаваемой на вход функции. Для этого производится генерация модельных экспериментальных функций, являющихся аналогами сигналов с детектора. Для этого производится перебор 3N параметров (N = 1, 2, 3, 4) гауссовых функций: высота, ширина и положение каждой гауссовой функции.

Решение данной задачи на основе классификации происходит при помощи сопоставления классов точкам в многомерном пространстве. Классы характеризуют истинное количество гауссовых функций, которыми была порождена модельная экспериментальная функция, и количество наблюдаемых пиков этой функции. Векторы из пространства, в котором происходит разделение классов, являются совокупностью значений, которые можно получать при помощи модельной экспериментальной функции: нормы от функции и ее производных, и параметры, получаемые за счет аппроксимации классическим алгоритмом (методом наименьших квадратов).

Методы на основе регрессии основаны на сопоставлении векторов из того же многомерного пространства, что используются в классификации, истинным параметрам гауссовых функций из сгенерированной модельной выборки.

Оба метода дают отличную точность на тестовой выборке: регрессия дает 97,6% точности (параметр r^2) при использовании метода случайного леса (сравниваются параметры заданной функции и параметры функции, которые получаются в результате регрессии), классификация — 95% точности при использовании метода ближайших соседей. Получение информации об истинных параметрах (результат регрессии) или номера класса (результат классификации) позволяет определить истинное количество гауссовых функций, что в свою очередь дает информацию о классе события (одноточечное, двухточечное, трехточечное и т. д.).

Литература

1. *Gavriljuk Yu. M.* [et al.]. 2K-Capture in ^{124}Xe: Results of Data Processing for an exposure of 37.7 kg day // Phys. Part. Nucl. 2018. V. 49(4). P. 563–568.
2. *Текуева Дж. А.* Поиск 2K-захвата ^{124}Xe: дис. … канд. физ.-мат. наук. М., 2019.
3. *Gavriljuk Yu. M.* [et al.]. Working characteristics of the New Low-Background laboratory (DULB-4900) // Nucl. Instrum. Meth. A. 2013. V. 729. P. 576–580.

УДК 530.145

Исследование устойчивости особых точек ренормгруппового потока потенциала Хиггса

М. В. Елисов, М. В. Долгополов

Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева

Метод ренормализационной группы в квантовой теории поля используется для исследования непрерывного преобразования лагранжиана, получаемого путем интегрирования по степеням свободы с большими импульсами и энергиями. При этом зависимость определяется дифференциальными уравнениями [1, 2].

Решение с квазификсированной точкой является особенностью уравнений ренормализационной группы (РГ). Существование квазинеподвижной точки означает, что решения уравнений РГ, соответствующие диапазону различных граничных значений фундаментальных параметров в масштабе высоких энергий, сфокусированы в узком интервале в инфракрасной области [3, 4]. Это позволяет нам получить некоторые предсказания для взаимодействий и физических наблюдаемых в низкоэнергетическом масштабе. Исследовалась модель, допускающая спонтанное нарушение симметрии. При этом подобная техника используется и в теории электрослабых взаимодействий [5, 6].

В работе были исследованы критические точки как характеристики асимптотического поведения, индуцированных переходов и эволюции поверхности экстремумов эффективных потенциалов Хиггса для оценки ряда характеристик теории, например, асимптотическая устойчивость в случае заданных параметров.

Для этого были оценены критические явления при эволюции поверхности экстремумов ряда потенциалов Хиггса. В модели с двумя скалярными полями (рис. 1) и в системе с двумя дублетами и синглетом комплексных полей. Первый потенциал показал сложное поведение с несколькими особыми точками. Усложненный потенциал исследовался ранее в рамках минимальной суперсимметричной модели, но там не были построены ренормгрупповые потоки [7, 8]. Проведено исследование ренормгрупповых потоков каплингов расширения сектора Хиггса стандартной модели. В результате исследования были определены

возможности оценки ренормгрупповых потоков каплингов расширенной модели, асимптотическое поведение и характеристики критических точек. Оценена существенность операторов. Рассмотрены предельные случаи высоких и низких температур и определены значения критической температуры и допустимой области параметров температурных вкладов в управляющие параметры потенциала двухдублетной модели для индуцированного электрослабого фазового перехода, построены графики в фазовых пространствах для констант взаимодействия. Полученные результаты говорят о существовании стабильных нетривиальных фиксированных точек, что говорит о симметрии O(2) асимптотически в ИК случае (рис. 1). Также точка (0,0) оказывается устойчивой, так как теория сводится к фиксированной точке свободного поля скалярной теории. Путем настройки мы можем получить широкий диапазон энергий, в котором неподвижные точки определяют поведение теории.

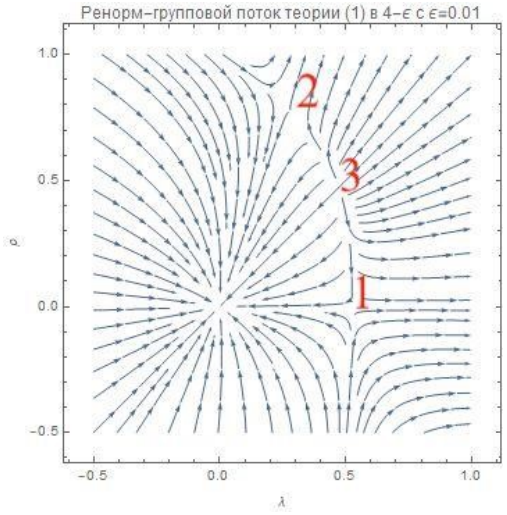


Рис. 1. Ренорм-групповой поток модели с двумя скалярными полями

Литература

1. *Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.* Введение в теорию квантованных полей. — М.: Наука, 1984.
2. *Пескин М., Шредер Д.* Введение в квантовую теорию поля. — Ижевск: РХД, 2001.
3. *Hill C. T., Leung C. N., Rao S.* Renormalization group fixed points and the Higgs boson spectrum // Nucl. Phys. 1985. V. 262. P. 517–537.
4. *Froggatt C. D.* [et al.]. Fixed point scenario in the Two Higgs Doublet Model inspired by degenerate vacua // Phys.Lett. 2007. V 657. P. 95–102.
5. *Boos E. E*. Induced spontaneous symmetry breaking chain // Europhysics Letters. 2021. V. 136. P. 21003–21008.
6. *Dolgopolov M. V., Elisov M. V.* Step-induced electroweak phase transition // Proceedings of the International Conference “Fundamental and Applied Problems of Modern Physics”. 2023: 120.
7. *Dolgopolov M.* Threshold Corrections to the MSSM Finite-Temperature Higgs Potential // Journal of Modern Physics. 2011. V. 2(5). P. 301–322.
8. *Allakhverdieva A. E., Dolgopolov M. V., Rykova E. N.* Restrictions On Parameters Of Minimal Supersymmetric Standard Model // Journal of Mathematical Sciences. 2022. V. 264(6). P. 672–683.

УДК 53.087.2, 53.089.5, 539.1.05

Вычисление скорости счета нейтрино от отдельных источников и оценка атмосферного фона в установке Baikal-GVD

***Д. Н. Заборов*[1,2], *М. И. Клейменов*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Нейтринный телескоп Baikal-GVD возводится в озере Байкал с целью исследования высокоэнергетических нейтрино от различных галактических и внегалактических источников. В работе представлены результаты расчета ожидаемой частоты регистрации астрофизических нейтрино в телескопе Baikal-GVD на уровне триггера и реконструкции для некоторых гипотетических и обнаруженных источников, отмеченных на рис. 1 цветными точками. В том числе представлен расчет ожидаемого числа событий от

хребта галактики, представленного на рис. 1 желтым прямоугольником. Также проведена оценка атмосферного нейтринного фона.

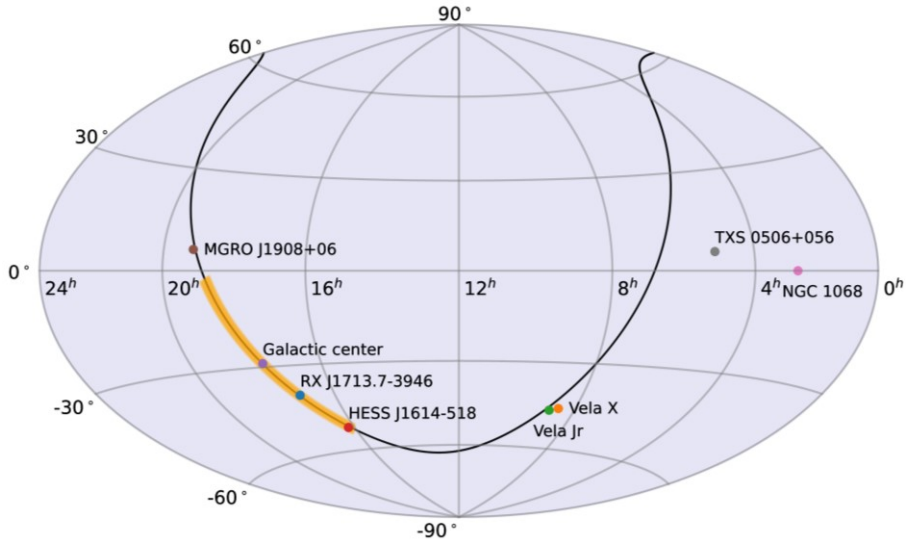


Рис. 1. Положения рассматриваемых источников на небесной сфере в галактической системе координат показаны цветными точками, сплошная черная линия — плоскость галактики

Из-за колоссального фона атмосферных мюонов в трековом канале регистрации нейтринный телескоп может наблюдать только за источниками, находящимися ниже уровня горизонта [1]. При прохождении потока высокоэнергетических нейтрино сквозь Землю эти частицы могут взаимодействовать с веществом посредством заряженного и нейтрального токов, что приводит к частичному поглощению и изменению спектра нейтрино. В работе вычисляется соответствующее изменение потока с помощью пакета vFATE [2] и дополнительно учитывается суточное движение источников по небесной сфере.

Для эффективного использования пакета энергетический диапазон разбивается на конечное число интервалов N и производится построение матрицы пропускания $T^m_{nn'}$:

$$\phi^{\text{out}}_{\nu_l}(E_n, \theta_m) = \sum_{n'=1}^{N} T^m_{nn'} \phi^{\text{in}}_{\nu_l}(E_{n'}, \theta_m), \quad (1)$$

где E_n — значение энергии, θ_m — значение зенитного угла, $\phi^{\text{in}}_{\nu_l}(E_{n'}, \theta_m)$ и $\phi^{\text{out}}_{\nu_l}(E_n, \theta_m)$ — спектральные плотности входящего и выходящего потоков нейтрино соответственно. Предсказания и измерения спектральной плотности потоков нейтрино для рассматриваемых источников взяты из работ [3–6]. Расчет числа фоновых событий использует спектр атмосферных нейтрино [7] и производится в предположении, что характерное угловое разрешение установки равно $0.5°$.

В вычислении скорости счета используется эффективная площадь детектора для однокластерных трековых событий $A_{ef} = A_{ef}(E, \theta)$ на уровне триггера и реконструкции. В расчетах предполагается конфигурация детектора из 20 кластеров, время набора данных считается равным 5 годам. Результаты вычислений для точечных источников приведены в табл. 1.

Таблица 1. Ожидаемые скорости счета нейтрино от источников (registration rate, RR) и от фона (background, BG) на уровне триггера (trigger) и реконструкции (reco)

Источник	RR, trigger	BG, trigger	RR, reco	BG, reco
RX J1713.7-3946	9.93	60.24	2.63	5.22
Vela X	16.58	60.57	5.71	5.56
Vela Jr	11.84	60.69	3.20	5.61
HESS J1614-518 (1)	5.26	61.96	1.82	6.03
HESS J1614-518 (2)	4.50	61.96	1.36	6.03
Galactic center	3.37	46.35	1.03	3.68
MGRO J1908+06 (1)	1.36	23.31	0.35	0.71
MGRO J1908+06 (2)	2.55	23.31	0.98	0.71
MGRO J1908+06 (3)	3.10	23.31	1.33	0.71
NGC 1068	59.31	26.13	2.06	0.86
TXS 0506+056 (1)	2.87	23.1	1.38	0.71
TXS 0506+056 (2)	2.68	23.1	1.46	0.71

Для определения скорости счета событий от галактического хребта производится его разбиение сеткой в предположении однородности потока в галактических координатах. Результаты вычислений представлены на рис. 2.

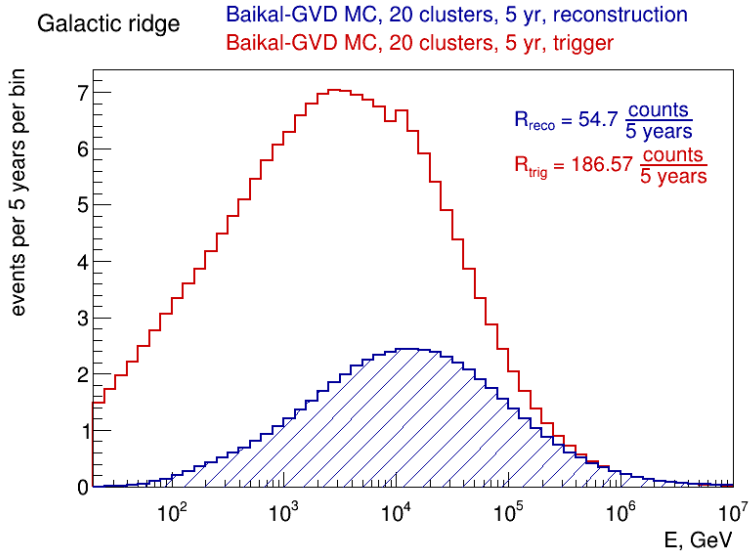


Рис. 2. Зависимость скорости регистрации нейтрино от хребта галактики от энергии на уровне триггера (красным) и реконструкции (синим). Полная скорость счета получается простым суммированием значений в бинах, она отображена в правом углу для уровней триггера и реконструкции соответственно

Литература

1. *Allakhverdyan V. A.* [et al.]. Measuring muon tracks in Baikal-GVD using a fast reconstruction algorithm // Eur. Phys. J. C. 2021. V. 81: 1025.
2. *Vincent A. C., Argüelles C. A., Kheirandish A.* High-energy neutrino attenuation in the Earth and its associated uncertainties // J. Cosmol. Astropart. Phys. 2017. V. 2017(11): 012.
3. *Aiello S.* [et al.]. Sensitivity of the KM3NeT/ARCA neutrino telescope to point-like neutrino sources // Astropart. Phys. 2019. V. 111. P. 100–110.
4. *Aartsen M.* [et al.]. Neutrino emission from the direction of the blazar TXS 0506+056 prior to the IceCube-170922A alert // Science. 2018. V. 361. P. 147–151.
5. *Abbasi R.* [et al.]. Evidence for neutrino emission from the nearby active galaxy NGC 1068 // Science. 2022. V. 378. P. 538–543.
6. *Halzen F.* [et al.]. Observation of high-energy neutrinos from the Galactic plane // Science. 2023. V. 380. P. 1338–1343.
7. *Agrawal V.* [et al.]. Atmospheric neutrino flux above 1 GeV // Phys. Rev. D. 1996. V. 53. P. 1314–1323.

УДК 539.1.074

Восстановление спектра антинейтрино в эксперименте DANSS

***Н. А. Машин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]НИЦ «Курчатовский институт»

Детектор DANSS (Detector of Antineutrino based on Solid Scintillator) [1] установлен на Калининской АЭС под активной зоной энергетического реактора. Чувствительный объем детектора состоит из 2500 сцинтилляционных счетчиков размера 1×4×100 см, покрытых светоотражающим слоем с содержанием гадолиния. Вокруг чувствительного объема детектора расположена пассивная защита, состоящая из слоев меди (5 см), борированного полиэтилена (8 см), свинца (5 см). Снаружи установлены сцинтилляционные счетчики, составляющие систему активного вето. В эксперименте регистрируются события обратного бета-распада (ОБР). Позитрон выделяет в детекторе кинетическую энергию и аннигилирует, давая мгновенный сигнал. Нейтрон сначала замедляется, а потом захватывается ядром гадолиния, которое впоследствии снимает возбуждение посредством излучения гамма-квантов и дает задержанный сигнал.

Практически вся энергия антинейтрино над порогом передается позитрону. Поэтому спектр зарегистрированных антинейтрино в первом приближении отличается от спектра позитронов лишь сдвигом. Однако имеется небольшой разброс в переданной нейтрону энергии, а также детектор имеет конечное энергетическое разрешение, вследствие чего имеет место дополнительное размытие спектра антинейтрино.

Одной из целей данного эксперимента является поиск осцилляций в стерильное состояние нейтрино и ограничение области допустимых параметров осцилляций. Поэтому важной частью эксперимента является восстановление спектра антинейтрино из спектра позитронов. Это позволяет непосредственно сравнивать восстановленный антинейтринный спектр с теоретическими предсказаниями, а также результатами других экспериментов.

В работе рассматривается метод восстановления спектра антинейтрино от реактора, основанный на сингулярном разложении матрицы отклика детектора [2]. Для оценки точности восстановления производится развертка искусственно сгенерированных методом Монте-Карло спектров позитронов. При расчете энергетических спектров позитронов в реакции ОБР использовались предсказания Хубера [3] и Мюллера [4] для потоков антинейтрино. Также в спектр антинейтрино искусственно добавлялся «бамп», который моделирует избыток событий в районе 6 МэВ, наблюдающийся во многих реакторных экспериментах, таких как (RENO, Daya Bay, STEREO, PROSPECT, NEOS).

Метод восстановления использует предположение о гладкости спектра антинейтрино. Такая регуляризация крайне необходима, однако может вносить смещение в развернутый спектр. Поэтому был предложен способ выбора параметра регуляризации, который позволяет найти компромисс между требованием гладкости спектра и внесенным смещением. Метод основан на генерации большого числа Монте-Карло спектров и сканировании кривой хи-квадрат между восстановленным спектром и заложенным в Монте-Карло.

Также в работе были исследованы систематические неопределенности, возникающие в эксперименте. Было показано, что в данном анализе основной вклад в систематическую неопределенность связан со сдвигом энергетической шкалы.

Метод показал хорошую точность при малом значении смещения при восстановлении Монте-Карло спектров антинейтрино, что дает основания для применения этого метода на реальных данных.

Литература

8. *Alekseev I.* [et al.] DANSS: Detector of the reactor AntiNeutrino based on Solid Scintillator // JINST. 2016. V. 11(11): 11011.
9. *Hoecker A., Kartvelishvili V.* SVD approach to data unfolding // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 1996. V. 372(3). P. 469–481.
10. *Huber P.* Determination of antineutrino spectra from nuclear reactors // Phys.Rev.C. 2011. V. 84(2): 024617.
11. *Mueller T. A.* [et al.]. Improved predictions of reactor antineutrino specta // Phys. Rev. C. 2011. V. 83(5): 054615.

УДК: 539.1.074.3, УДК: 539.1.074.4

Модернизация передних детекторов в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере (ЦЕРН)

М. А. Суханов, Н. О. Вознюк, Т. Л. Каравичева, Д. В. Серебряков, А. А. Фурс

Институт ядерных исследований РАН

В результате модернизации детекторных систем установки ALICE в 2019-2022 гг. на Большом адронном коллайдере (БАК/LHC) в ЦЕРН разработана и введена в эксплуатацию новая многофункциональная триггерная система FIT (Fast Interaction Trigger), состоящая из трех детекторов (FT0, FV0, FDD), использующих различные технологии регистрации частиц [1]. Система детекторов FIT (рис. 1) предназначена для идентификации заряженных частиц, определения центральности ядро-ядерных столкновений, плоскости реакции и является основным триггерным детектором эксперимента ALICE. Триггерные сигналы по центральности и положению вершины используются для измерения светимости и индикации фоновых событий. Также FIT используется для изучения ультрапериферических столкновений. Детектор работает на самом низком по задержке (<425 нс) триггерном уровне, а его считывающая электроника позволяет регистрировать события каждые 25 нс, что соответствует периоду тактового сигнала LHC и обеспечивает сбор данных в триггерном и непрерывном режимах [2].

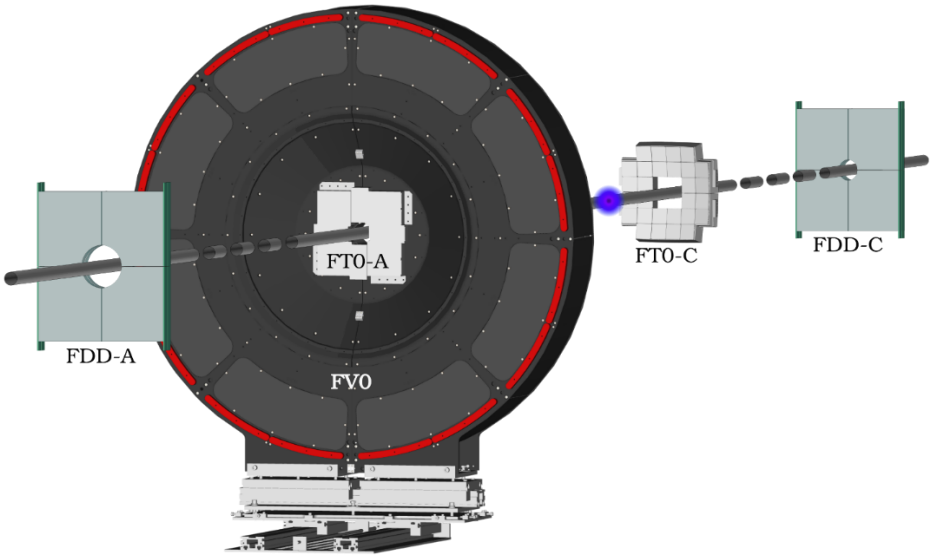


Рис. 9. Система передних детекторов FIT

На протяжении 2022 — 2023 гг. детектор FIT показал исключительные результаты. Его триггеры по положению вершины и центральности использовались в качестве основных и дополнительных опорных значений для определения мгновенной светимости в протон-протонных столкновениях и столкновениях ядер свинца в режиме реального времени. Временное разрешение детектора FT0 составило рекордные 13 пс для протон-протонных столкновений и 4 пс при столкновении тяжелых ионов. В данной работе подробно описана детекторная система FIT и результаты ее работы с момента начала набора данных.

Литература

1. *Trzaska W. H.* [et al.]. New ALICE detectors for Run 3 and 4 at the CERN LHC // Nucl. Instrum. Methods A. 2020. V. 958: 162116. DOI: 10.1016/j.nima.2019.04.070.
2. *Slupecki M.* Fast Interaction Trigger for ALICE upgrade // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2022. V. 1039, DOI: 10.1016/j.nima.2022.16702.

УДК 539.126.4

Исследование инклюзивных полулептонных распадов Bs мезонов в эксперименте Belle

***Н. А. Петерс*[1,2], *П. Н. Пахлов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Элементы матрицы Кабиббо-Кобаяши-Маскавы (ККМ) [1] являются фундаментальными параметрами Стандартной модели (СМ) в физике элементарных частиц. Таким образом, изучение параметров является мощным тестом теории. В частности, более точные измерения $|V_{cb}|$ могут стать указанием на Новую физику за пределами СМ. Значение $|V_{cb}|$ определяется в анализах инклюзивных и эксклюзивных полулептонных распадов B мезонов в конечные состояния с очарованными адронами. В анализе инклюзивного распада исследуется сумма всех возможных конечных состояний, а в анализе эксклюзивного восстанавливается конкретный очарованный адрон, такой как $D_s^{(*)}$.

Согласно [2], современные измерения значения параметра матрицы ККМ $\left|V_{cb}^{incl}\right| = (42.19 \pm 0.78) \times 10^3$ и $\left|V_{cb}^{excl}\right| = (39.25 \pm 0.56) \times 10^3$, полученные двумя различными способами, различаются почти на 3 стандартных отклонения. Однако новый результат, полученный коллаборацией LHCb из анализа эксклюзивного распада B_s мезона, $(41.4 \pm 0.6 \pm 0.9 \pm 1.2) \times 10^3$ и $(42.3 \pm 0.8 \pm 0.9 \pm 1.2) \times 10^3$ для двух различных параметризаций форм-факторов, оказался значительно больше предыдущих измерений. Вследствие этого основной мотивацией исследования является проведение первого анализа инклюзивного распада $B_s \to X_c \ell \nu_\ell$ в эксперименте Belle, а также осуществление прямого измерения абсолютной вероятности данного распада.

В рамках работы проводится исследование кинематики рождения $\overline{B_s}B_s$ для последующей оптимизации восстановления импульса потерянного нейтрино. Извлечение $|V_{cb}|$ основывается на точных измерениях совокупности величин: энергии заряженного лептона, массы и энергии адронной части [4,5]. Для этого используется метод адронного тагирования, то есть полное восстановление одного из B_s мезонов по адронным каналам для исследования второго, после чего из остатка события восстанавливается электрон или мюон с наибольшим импульсом, а оставшиеся частицы приписываются к X_c.

Таким образом, в работе был предложен метод восстановления и оптимизации разрешения сигнала для полулептонных распадов B_s и получены первые измерения спектральных моментов, необходимых для дальнейшего вычисления $|V_{cb}|$.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Литература

1. *Kobayashi M., Maskawa T.* CP-violation in the renormalizable theory of weak interaction // Prog. Theor. Phys. 1973. V. 49(2). P. 652–657.
2. *Amhis Y., Banerjee Sw.* [et al.]. Averages of b-hadron, c -hadron, and τ-lepton properties as of 2018 // Eur. Phys. J. 2021. V. 81(3): 226. DOI: 10.1140/epjc/s10052-020-8156-7.
3. *Aaij R.* [et al.]. Measurement of $|V_{cb}|$ with $B_s^0 \to D_s^{(*)-}\mu^+\nu_\mu$ decays // Phys. Rev. D. 2020. V. 101(7): 072004. DOI: 10.1103/PhysRevD.101.072004.
4. *Bernlochner F.* [et al.]. First extraction of inclusive V_{cb} from q^2 moments // J. High Energy Phys. 2022. V. 2022(10): 68. DOI: 10.1007/JHEP10(2022)068.
5. *Fael M., Mannel T., Keri Vos. K.* V_{cb} determination from inclusive $b \to c$ decays: an alternative method // J. High Energy Phys. 2019. V. 2019(2): 177. DOI: 10.1007/JHEP02(2019)177.

УДК 539.126.33, 539.1.074.6

Возможности сцинтилляционного детектора LVD для изучения мюонов высоких энергий

О. Ю. Слуцкая*[1], *Н. Ю. Агафонова*[2], *LVD-коллаборация

[1]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
[2]Институт ядерных исследований РАН

Детектор большого объема (Large Volume Detector), находящийся в низкофоновой итальянской лаборатории Гран Сассо, работает с 1992 года [1]. Эксперимент направлен на регистрацию нейтрино от коллапсов звездных ядер в нашей Галактике [2]. Установка состоит из сцинтилляционных счетчиков размером 1.5 м^3, заполненных жидким сцинтиллятором на основе уайт-спирита (C_nH_{2n}). Каждый счетчик просматривается тремя фотоэлектронными умножителями. Счетчики сгруппированы по 8, в специальные модули — железные портатанки. Портатанки образуют 5 колон и 7 уровней и разделены на 3 башни. Размер установки 22 м × 12 м × 10 м. Всего счетчиков в детекторе — 840.

Глубина расположения детектора — <H> = 3600 м в. э. понижает интенсивность космического излучения в 10^6 раз. Профиль горного массива позволяет регистрировать мюоны на глубинах от 3 до 15 км в. э. Атмосферные мюоны генерируются при распаде мезонов, образованных в атмосфере космическими лучами. Мюоны, достигающие установки имеют пороговую энергию около 1 ТэВ. Интенсивность мюонов, регистрируемых на LVD $I_0 = 3.35 \pm 0.0005$стат $\pm$ 0.03сис $\times 10^{-4}$ м$^{-2}$ с$^{-1}$ [3]. Поток мюонов вверх очень низок, менее 100 мюонов в год [4].

Модульная структура детектора позволяет реконструировать направление прихода мюона и определять энерговыделение в счетчиках по треку в счетчике.

На рис. 1 показано распределение энерговыделений в одном счетчике LVD. Это распределение имеет характерный максимум — так называемый мюонный пик в районе 185 МэВ [5]. Эта энергия соответствует наиболее вероятной длине трека мюона при прохождении мюона через счетчик. E=(dE/dx)$x\rho$, где dE/dx =2.4 МэВ/г/см^2 — средние потери мюона (для мюона со средней энергией около 300 ГэВ), x — расстояние, пройденное мюоном в счетчике в см, ρ=0.78 г/см^3 — плотность сцинтиллятора.

При прохождении через всю установку по центру мюон «зажигает» в среднем от 7 до 12 счетчиков, которые дают энерговыделения больше 20 МэВ. На рисунке 2 показано распределение суммарных энерговыделений от мюона во всем детекторе. Если бы мюон прошел квазивертикально, то его суммарное энерговыделение было (7 × 185 МэВ) = 1295 МэВ. Область небольших значений соответствует мюонам,

прошедшим через края детектора. Мюоны, пошедшие только через один счетчик детектора, выбрасываются из анализа. Область больших суммарных энерговыделений — это события, в которых зарегистрированы группы мюонов и электромагнитные и ядерные ливни, рожденные мюоном.

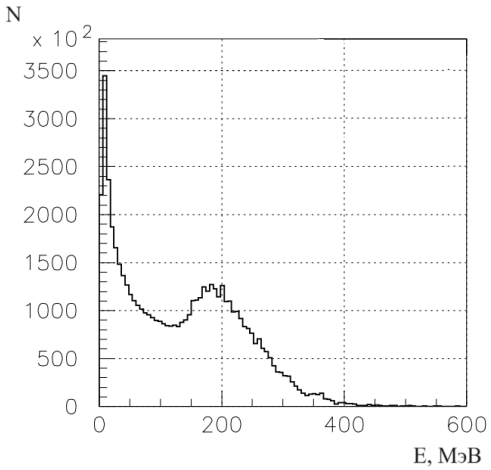


Рис. 1. Распределение энерговыделений в одном счетчике LVD

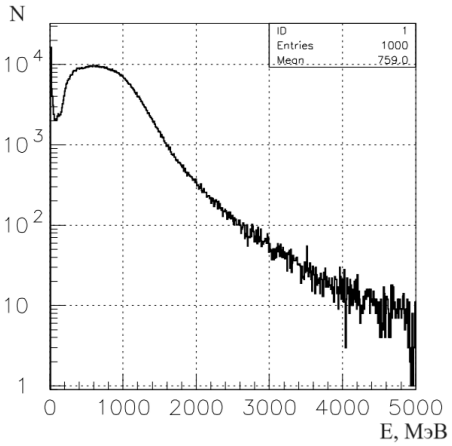


Рис. 2. Распределение суммарных энерговыделений в мюонном событии

Мюонные события с суммарными энерговыделениями $E > 2000$ МэВ представляют интерес для изучения мюонов высоких энергий. В рамках этой работы было получено, что время между срабатываниями счетчиков в событии не превышает 200 нс (рис. 3). В анализе этих данных использовалась статистика за 80 суток работы детектора. Отобраны события, в которых сработало больше, чем 20 счетчиков. Это говорит о том, что это один мюон или группа мюонов, рожденная в одном акте взаимодействия. Большие энерговыделения (превышающие в 2 раза) в одном счетчике указывают на то, что детектор зарегистрировал узкую мюонную пару, расстояние между траекториями в которой меньше 1 м.

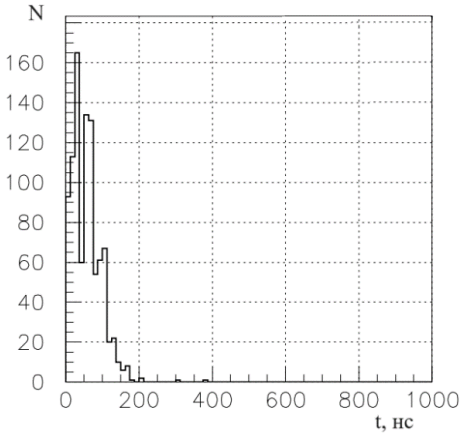


Рис. 3. Распределение времени срабатывании счетчиков в мюонном событии

Литература

1. *Bari G* [et al.]. LVD at Gran Sasso // NIM A 1988. V. 264. P. 5–17.
2. *Agafonova N.* [et al.]. Implication for the core-collapse supernova rate from 21 years of data of the Large Volume Detector // Astrophysical J. 2015. V. 802: 47.
3. *Agafonova N.Yu*. [et al.]. Characterization of the varying flux of atmospheric muons measured with the Large Volume Detector for 24 years // Phys. Rev. D. 2019. V. 100: 062002.
4. *Беттини А.* Физика за пределами стандартной модели. Эксперименты в Лаборатории Гран Сассо // УФН. 2001. Т. 171. № 9. С. 977–1003.
5. *Агафонова Н. Ю.* Изучение мюонов космических лучей и нейтронов, генерированных ими под землей в детекторе LVD: дис. … канд. физ.-мат. наук. М., 2015.

УДК 539.17

Исследование угловых корреляций в реакциях неупругого рассеяния на быстрых нейтронах

***П. Г. Филончик*[1,2,3], *А. Л. Барабанов*[1,3], *Д. Н. Грозданов*[2,4], *Н. А. Федоров*[2], *Ю. Н. Копач*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
[4]Институт ядерных исследований и ядерной энергии Болгарской академии наук

Информация о корреляциях между $\boldsymbol{\gamma}$-квантами и нейтронами в реакции $(\boldsymbol{n,n'\gamma})$ необходима для понимания механизмов неупругого рассеяния нейтронов, а также для оценки вкладов прямых процессов и процессов, идущих через образование компаунд-ядра. Механизм неупругого рассеяния с образованием компаунд-ядра подробно разобран в работе [1], а в работе [2] есть описание неупругого рассеяния, идущего через прямую реакцию. Формализм, описанный в работе [1], хорошо подходит для рассеяния частиц с низкими энергиями, но плохо воспроизводит сечения и угловые распределения продуктов реакций с нейтронами энергии 14 МэВ [3]. Экспериментальных работ по исследованию угловых корреляций $(\boldsymbol{n'\gamma})$ в реакциях с нейтронами с энергией 14 МэВ не так много, большая часть из них была выполнена более 40 лет назад с довольно низкой точностью [4, 5]. Недавно $(\boldsymbol{n'\gamma})$–корреляции были измерены в реакции неупругого рассеяния нейтронов на углероде при различных энергиях [6], при этом результаты не всегда согласуются с предыдущими экспериментами. Таким образом, измерения $(\boldsymbol{n'\gamma})$-корреляций с хорошей точностью и высоким угловым разрешением представляют несомненный интерес.

В настоящее время на установке TANGRA (TAgged Neutrons and Ramma-RAys) в лаборатории нейтронной физики им. Франка в ОИЯИ проводится эксперимент по измерению угловых корреляций $(\boldsymbol{n'\gamma})$ в реакции неупругого рассеяния нейтронов с энергией 14,1 МэВ на ядре ^{12}C. Ядро углерода удобно тем, что лишь первый его возбужденный уровень распадается с испусканием гамма-кванта. В эксперименте используется метод меченых нейтронов [3]. Он позволяет подсчитывать нейтроны в эксперименте с высокой точностью, а также эффективно выделять полезные события, связанные с реакциями в образце. Для регистрации нейтронов и $\boldsymbol{\gamma}$-квантов используются 12 пластиковых сцинтилляционных детекторов (длиной 1 м) с двумя ФЭУ. Десять из них расположены в плоскости вокруг мишени на расстоянии 1 м от нее, а два других располагаются перпендикулярно этой плоскости (рис. 1). Система детекторов имеет временное разрешение порядка 3 нс и пространственное разрешение порядка 20 см. Это позволяет нам получить хорошее угловое разрешение и разделять по времени пролета $\boldsymbol{\gamma}$-кванты и нейтроны (рис. 2).

В реакции $(\boldsymbol{n,n'\gamma})$ угловое распределение испускаемых ядром $\boldsymbol{\gamma}$-кванта зависит от угла вылета неупруго рассеянного нейтрона. Эту зависимость мы называем угловой корреляцией $(\boldsymbol{n'\gamma})$. Нами получена формула для этой угловой корреляции:

$$\boldsymbol{d\omega(\vec{n}_\gamma) = A \sum_{Q=0,2,4\ldots} \sum_{\Lambda\Lambda'} D^{\Lambda}_{\Lambda' Q}\, \phi^{\Lambda}_{\Lambda' Q}(\vec{n}_k, \vec{n}_\beta, \vec{n}_\gamma) d\Omega}\,. \qquad (1)$$

В формулу (1) входят: A — нормировочный множитель, $\boldsymbol{D^{\Lambda}_{\Lambda' Q}}$ — величины, включающие в себя как элементы S-матрицы реакции неупругого рассеяния, так и коэффициенты проницаемости нейтронов, а также угловые инвариантные сферические функции [7, 8]:

$$\phi^{\Lambda}_{\Lambda' Q}(\vec{n}_k, \vec{n}_\beta, \vec{n}_\gamma) = (4\pi)^{\frac{3}{2}} \sum_{q\mu\nu} C^{Qq}_{M\mu N\nu}\, Y^{*}_{Qq}(\vec{n}_k)\, Y_{M\mu}(\vec{n}_\beta)\, Y_{N\nu}(\vec{n}_\gamma). \quad (2)$$

Элементы S-матрицы и коэффициенты вычисляются нами с помощью кода ECIS, входящего в состав программы TALYS.

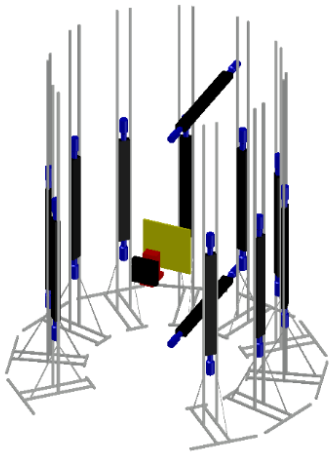


Рис. 1. Геометрия установки: в центре желтым цветом обозначена мишень из углерода, рядом красным и черным — генератор нейтронов с альфа-детектором; вокруг мишени, сверху и снизу мишени — черным с синим цветом — обозначены длинные пластиковые сцинтилляционные детекторы с двумя ФЭУ, серым — крепления детекторов

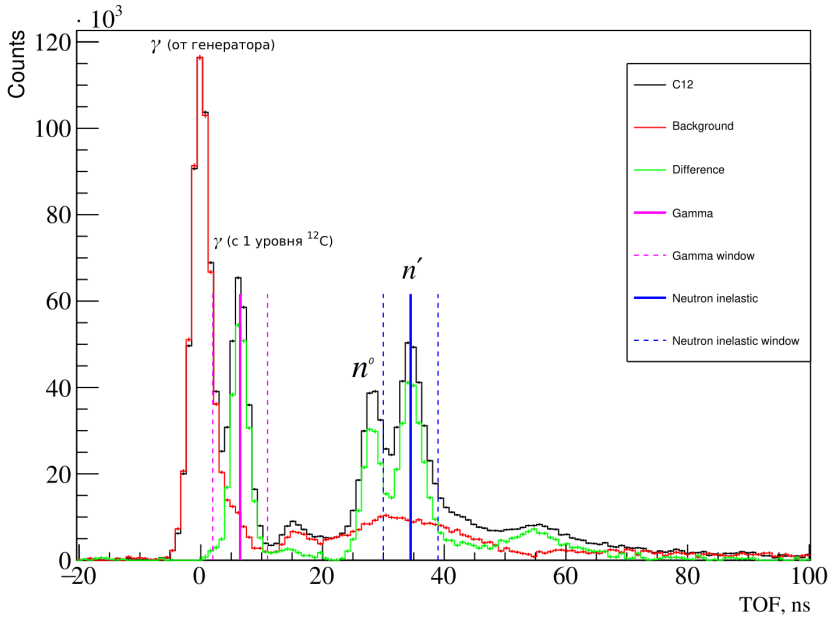


Рис. 2. Времяпролетный спектр гамма-квантов и нейтронов для одного из детекторов

На данном этапе работы также получены параметры a_l анизотропии вылета γ-квантов в реакции неупругого рассеяния нейтрона с энергией 14,1 МэВ на ядре углерода (рис.3) в сравнении с работами других авторов (табл.1). Анизотропия вылета γ-квантов определяется формулой

$$W(\theta) = 1 + \sum_{l=2,4,\ldots}^{2J} a_l P_l(\cos\theta). \quad (3)$$

Результаты являются предварительными, так как в них не учтены коэффициенты поглощения и перерассеяния в мишени.

В ближайшее время планируется получить из эксперимента (n'γ)-корреляции и сравнить их с результатами вычислений в рамках разработанного нами формализма.

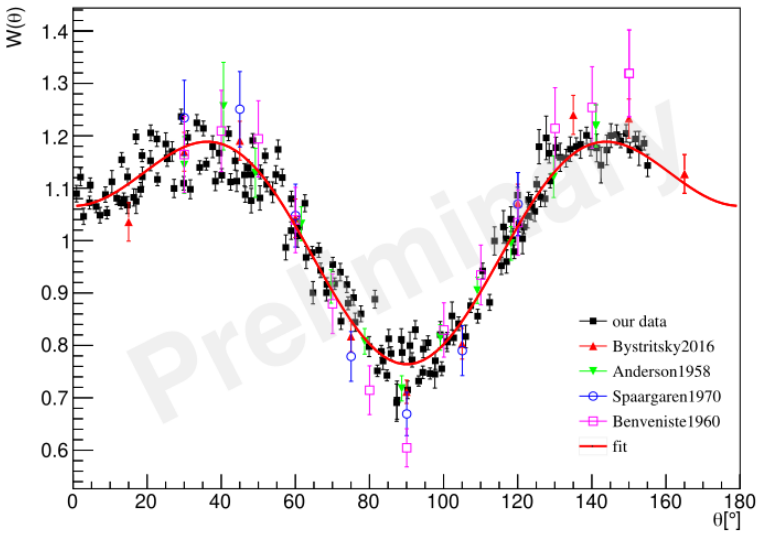


Рис. 3. Угловое распределение γ-квантов с энергией 4,43 МэВ в реакции неупругого рассеяния нейтронов с энергией 14,1 МэВ на ^{12}C

Таблица 1. Параметры анизотропии γ-квантов

Работа	a_2	a_4
Наши данные	$\mathbf{0,364 \pm 0,01}$	$\mathbf{-0,237 \pm 0,01}$
Bystritsky	$\mathbf{0,34 \pm 0,02}$	$\mathbf{-0,33 \pm -0,0}$
Anderson	$\mathbf{0,29 \pm 0,02}$	$\mathbf{-0,28 \pm 0,02}$
Benvensite	$\mathbf{0,37 \pm 0,05}$	$\mathbf{-0,39 \pm 0,07}$
Spaargaren	$\mathbf{0,39 \pm 0,01}$	$\mathbf{-0,37 \pm 0,01}$

Литература

1. *Sheldon E.* Angular Correlations in Inelastic Neutron Scattering // Rev. Mod. Phys. 1963. V. 35 P. 795–853.
2. *Clegg A. B., Satchler G. R.* Gamma-rays from inelastic scattering of high energy nucleons // Nucl. Phys. 1961. V. 27. P. 431–447.
3. *Федоров Н. А.* [и др.]. Исследование неупругого рассеяния нейтронов с энергией 14.1 МэВ на ядрах кислорода и кремния // Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та. 2018. № 2: 1820205.
4. *Benetskii B. A., Frank I. M.* Angular correlation between gamma rays and 14-MeV neutrons scattered inelastically by carbon // Soviet Physics JETP. 1963. V. 17(2). P. 309–313.
5. *Zamudio J., Romero L., Morales R.* Angular correlation measurements of ^{12}C(n, n′γ)^{12}C at 14.7 MeV // Nucl. Phys. 1967. V. A96. P. 449-462.
6. *Kelly K. J.* [et al.]. Correlated n-γ angular distribution from Q=4.4398 MeV ^{12}C(n, n′γ) reaction for incident neutron energies from 6.5 MeV to 16.5 MeV // Phys. Rev. C. 2021. V. 104: 064614.
7. *Biedenharn L. C., Louck J. D.* Angular Momentum in Quantum Physics: Theory and Application. V. 8. — Massachusetts: Addison-Wesley, 1981.
8. *Барабанов А. Л.* Симметрии и спин-угловые корреляции в реакциях и распадах. — М.: Физматлит, 2010.

УДК 539.1.08

Исследование характеристик амплитудно-временного нейтронного детектора на космическом излучении

***С. М. Ахмад*[1], *В. А. Басков*[2], *А. И. Львов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

На пучке тормозных фотонов с максимальной энергией 500 МэВ электронного ускорителя С-25Р «Пахра» Физического института им. П. Н. Лебедева РАН в Троицке готовится эксперимент по изучению нейтрон-нейтронного рассеяния. Ввиду отсутствия в распоряжении экспериментаторов чистой плотной нейтронной мишени, для изучения *nn*-рассеяния предполагается использовать дейтериевую мишень

(фактически — дейтерированный полиэтилен) и рождать в ней фотонами с энергий, достаточной для возбуждения Δ(1232)-резонанса, быстрые нейтроны, вылетающие вперед, в реакции резонансного фоторождения. В этой реакции $\gamma p \rightarrow \pi^+ n$ заряженный пион π^+ летит назад. Быстрые нейтроны за счет столкновений с нейтронами-спектаторами в тех же дейтронах *d* будут упруго рассеиваться, порождая пары энергичных нейтронов *nn*, разлетающихся из мишени по разные стороны от *γ*-пучка. Регистрация таких *nn*-пар одновременно с заряженным пионом, вылетающим назад, а также измерением угловых распределений и дифференциальных сечений рождения позволит судить об амплитуде *nn*-рассеяния, тем самым получая труднодоступную, но очень ценную информацию об этом канале *NN*-взаимодействия. Сходные идеи использования реакции $\gamma d \rightarrow \pi^+ nn$ для измерения длин *nn*-рассеяния теоретически обсуждались в работе [1], рассматривающей динамику процесса в околопороговой области энергий в рамках киральной теории возмущений.

Работа сооружаемой экспериментальной установки основана на времяпролетном методе. Сбор данных в режиме on-line будет осуществляться с помощью системы *CAMAC*. Триггером для запуска установки, или сигналом *Start*, будет регистрация π^+, рожденного на первом этапе фотореакции. Сигналом *Stop* будет регистрация двух провзаимодействовавших нейтронов с поперечными импульсами масштаба сотни МэВ/*c*, разлетающихся по разные стороны от мишени. Регистрацию нейтронов предполагается осуществлять двумя нейтронными детекторами, конструкция которых предполагает наличие амплитудной и временной частей.

Для регистрации одного из нейтронов создан амплитудно-временной детектор, представляющий из себя сцинтилляционный блок диаметром Ø40 см и толщиной 40 см. Блок просматривается тремя фотоэлектронными умножителями ФЭУ-49 и четырьмя ФЭУ-85. Сумма сигналов с ФЭУ-49 определяет амплитудный сигнал, сумма сигналов с ФЭУ-85 определяет временной сигнал.

Калибровка детектора осуществлена на космическом излучении [2]. Целью калибровки являлось определение энергетических и временных характеристик нейтронного детектора на одиночных минимально-ионизирующих частицах. Калибровка осуществлена по методу «напролет», когда детектор располагался между триггерными сцинтилляционными счетчиками, расположенными над и под детектором [3]. Для выделения жесткой компоненты космического излучения между детектором и триггерными счетчиками, расположенными над ним, помещался свинцовый фильтр толщиной 7 см.

Так как толщина детектора составляла 40 см, то среднее энерговыделение в детекторе от прохождения космических мюонов составило в среднем 80 МэВ (рис.1). Относительное энергетическое разрешение детектора составило $\delta \approx 7\%$.

Временная калибровка нейтронного детектора заключалась в определении цены деления каналов блока время-цифрового преобразователя (*ВЦП*), с помощью которого будут определяться временные интервалы между сигналами *Start* и *Stop* в эксперименте, и временного разрешения временной части детектора.

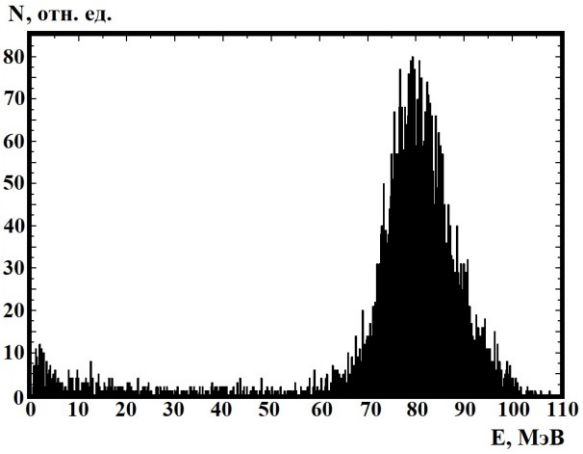


Рис. 1. Спектр среднего энерговыделения космических мюонов в амплитудно-временном нейтронном детекторе

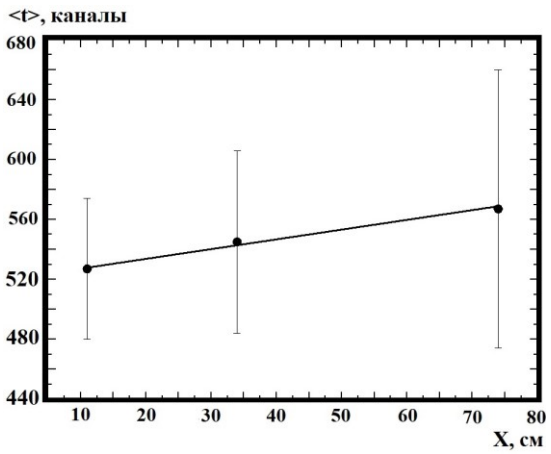


Рис. 2. Зависимость среднего канала временного спектра временной части детектора от расстояния между триггерными счетчиками и нейтронным детектором

Зависимость изменения среднего канала временного спектра временной части детектора от расстояния между триггерными счетчиками и нейтронным детектором показана на рис. 2. Зависимость, являющаяся калибровочной кривой, имеет линейный характер $<t> = kx$, где $k = 0.635$ канал/см. С учетом того, что время прохождения мюоном 100 см составляет ≈5 нс, а время прохождения мюоном 63 см между крайними положениями триггерных счетчиков составляет 40 каналов, то цена деления канала блока *ВЦП* составляет 79 пс.

Литература

1. *Lensky V.* [et al.]. Neutron-neutron scattering length from the reaction γd→π^+nn employing chiral perturbation theory // European Physical Journal A. 2007. V. 33. P. 339–348. DOI: 10.1140/epja/i2007-10461-y.
2. *Petrukhin A. A.* [et al.]. Cosmic Ray Muons of High and Ultrahigh Energies // Physics of Particles and Nuclei. 2018. V. 49. P. 639–651. DOI: 10.1134/S1063779618040469.
3. *Алексеев В. И.* [и др.]. Калибровка ливневого свинцово-сцинтилляционного спектрометра на космическом излучении // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2020. Вып. 9. С. 12–19. DOI: 10.3103/S106833562009002X.

УДК 539.123.6

Проверка симметрии спектров бета- и антинейтрино при бета-распаде

***С. В. Ингерман*[1], *В. В. Синев*[1,2]**

[1] Институт ядерных исследований РАН
[2] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Механизм бета-распада в природе пока до конца не изучен. Сравнение зеркальных энергетических спектров электрона и антинейтрино может помочь в понимании процессов, идущих при бета-распаде. Для измерения спектра антинейтрино какого-либо известного бета-распадающегося изотопа требуется специальный эксперимент с использованием большого детектора и очень мощного источника (несколько сот кКи или порядка нескольких единиц МКи). Для проведения такого эксперимента можно выбрать один из уже ведущихся экспериментов с использованием детектора большого объема. Другая возможность заключается в проведении специального эксперимента с относительно небольшим детектором вблизи мощного источника смеси известных бета-распадающихся изотопов, например, хранилище отработанного топлива на АЭС. Если будут обнаружены достаточно заметные различия в форме спектров, то метод расчета спектра антинейтрино может быть пересмотрен.

Спектр антинейтрино от отдельного изотопа до сих пор никогда не измерялся. В экспериментах с реакторными антинейтрино был измерен только спектр, содержащий тысячи отдельных спектров (см., например, последние эксперименты с высокой статистикой [1–3]). Но, используя этот спектр, невозможно проверить, точно ли отражен спектр антинейтрино относительно электронного.

Тест на зеркальную симметрию спектров антинейтрино и электрона может быть проведен путем непосредственного измерения спектра антинейтрино от любого известного бета-распадающегося изотопа и сравнения его со своим бета-спектром. Современные детекторные технологии позволяют измерять спектр антинейтрино от отдельного изотопа при наличии достаточно мощного источника. Прогресс в обнаружении антинейтрино в экспериментах с реакторным спектром антинейтрино позволяет измерять антинейтрино отдельных изотопов. Проблема состоит только в том, чтобы получить мощный источник антинейтрино чистого бета-распадающегося изотопа.

Мы предлагаем провести эксперимент по измерению спектра антинейтрино с использованием высокоактивного радиоактивного источника $^{90}Sr-\ ^{90}Y$ (1–2 МКи), который может быть размещен вблизи существующих в настоящее время детекторов (например, на верхней крышке) проводимых экспериментов с большими нейтринными детекторами (KamLAND, SNO+). Другой возможностью измерения известного спектра антинейтрино является установка относительно небольшого детектора вблизи хранилища отработанного топлива какой-либо атомной электростанции (АЭС). Обычно антинейтринный спектр отработанного топлива представляет из себя смесь спектров трех долгоживущих изотопов (^{90}Sr, ^{106}Ru и ^{144}Ce).

Литература

1. Improved measurement of the reactor antineutrino flux and spectrum at Daya Bay / Daya Bay Collaboration // Chinese Physics C 2017. V. 41(1): 13002.
2. Observation of reactor antineutrino disappearance using delayed neutron capture on hydrogen at RENO / The RENO collaboration // J. High Energ. Phys. 2020. V. 2020: 29.
3. Double Chooz measurement via total neutron capture detection / The Double Chooz Collaboration // Nat. Phys. 2020. V. 16. P. 558–564.

УДК 621.384.6

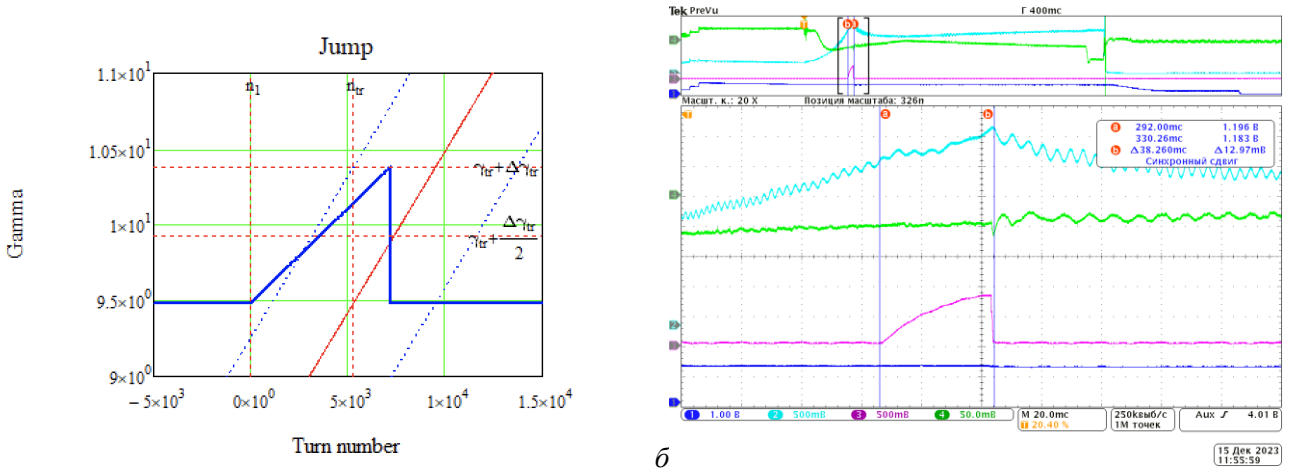
Возможные способы преодоления критической энергии поляризованным протонным пучком в комплексе NICA

С. Д. Колокольчиков[1,2], *Ю. В. Сеничев*[1,2], *А. Е. Аксентьев*[1,2,3], *А. А. Мельников*[1,2,4]

[1]Институт ядерных исследований РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
[4]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау

Рассматривается проблема прохождения пучком поляризованных протонов критической энергии в кольце коллайдера NICA (Nuclotron-based Ion Collider fAcility) при ускорении до 13 ГэВ [1]. Критическая энергия составляет порядка 5,7 ГэВ. Таким образом, она не представляет опасности для тяжелоионных экспериментов при конечной энергии пучка 4,5 ГэВ. Однако должна быть исследована для протонов, так как накладывает ограничения на конечную светимость.

Комплекс ОИЯИ г. Дубна NICA является многофункциональным центром исследований. Который включает в себя коллайдер, Бустер (Booster) и Нуклотрон (Nuclotron). Нуклотрон может быть использован, помимо прочего, в качестве бустера для коллайдера, тогда инжекция осуществляется при энергии пучка порядка 2–3 ГэВ. После накопления, осуществляется соответствующее электронное охлаждение в кольце коллайдера.



а *б*

Рис. 1. Принципиальная схема скачка критической энергии для У-70 (*а*); Скачок критической энергии на сеансе У-70 (б), фиолетовая — скачок градиента в дополнительных квадруполях, голубая — сигнал с пикового детектора, зеленая — сигнал с фазового датчика, синяя — интенсивность сгустка

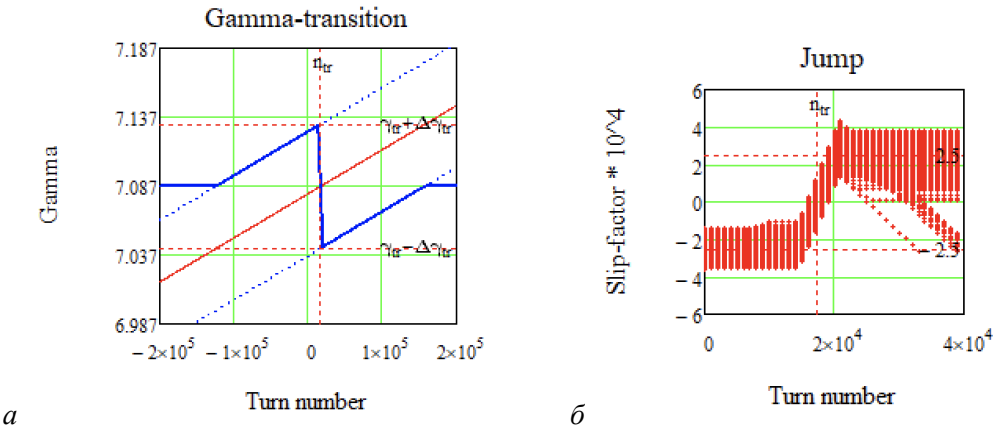
Коллайдер оснащен 3-мя ускоряющими ВЧ-станциями: ВЧ-1 — барьерная, ВЧ-2 и ВЧ-3 — гармонические. С целью изучения прохождения критической энергии в гармоническом ВЧ, приведены экспериментальные данные с сеанса на синхротроне У-70. Применяется метод быстрого скачка критической энергии без изменения бетатронной частоты. Применяется модуляция дисперсионной функции (Ур. 1), установкой дополнительных квадруполей (рис. 1) [2].

$$\alpha = \frac{1}{\gamma_{\mathrm{tr}}^2} = \frac{1}{C}\int_0^C \frac{D(s)}{\rho(s)}\,ds. \qquad (1)$$

Предполагаемый скачок критической энергии NICA, осуществляется всеми фокусирующими квадруполями поворотной арки, что отличает его от скачка У-70. При таком способе происходит сдвиг бетатронных частот, что приводит к ограничению величины скачка. Ограниченный темп изменения градиентов квадруполей приводит к ограничению темпа изменения критической энергии. Таким образом, при использовании гармонического ВЧ, скачок окажется незначительным с точки зрения продольной динамики.

Описанный для NICA скачок рассмотрен аналитически и числено для барьерного ВЧ [3]. В этом случае, темп ускорения крайне мал $d\gamma/dt = 0.2\ \mathrm{c}^{-1}$ по сравнению с гармоническим ВЧ ($d\gamma/dt = 30 -$

300 $с^{-1}$). При этом ускорение происходит индукционно для всех частиц, а не сдвигом равновесной фазы. Удержание пучка в фазовой плоскости — отражением от барьеров. Приведенные особенности барьерного ВЧ и скачка приводят к необходимости приближения коэффициента скольжения до $\eta_0 = 3 \times 10^{-4}$ и влиянию нелинейности коэффициента скольжения на фазовую плоскость (рис. 2). Первое налагает существенное ограничение на количество частиц из-за микроволновой продольной неустойчивости, второе искажает равномерное фазовое распределение.



а *б*

Рис. 2. Принципиальная схема скачка критической энергии NICA для барьерного ВЧ (*а*); скачок коэффициента скольжения (slip-factor) через нулевое значение для частиц с различным разбросом по импульсу (*б*)

Альтернативный метод преодоления критической энергии — создание резонансной структуры с повышенным значением критической энергии во всем диапазоне энергий. Такой метод требует введения суперпериодической модуляции дисперсии на арках двумя семействами квадруполей с отдельным питанием [4].

С целью избежания прохождения критической энергии в коллайдере, рассматривается возможность инжектирования выше критической энергии. Однако в этом случае необходимо модернизировать Нуклотрон и иметь электронное охлаждение в коллайдере при энергии пучка 7–8 ГэВ.

Литература

1. *Сыресин Е. М.* [и др.]. Формирование поляризованных протонных пучков в ускорительных комплексе NICA // ЭЧАЯ. 2021. Т. 52. № 5. С. 1305–1341. DOI: 10.1134/S1063779621050051.
2. *Пашков П. Т.* Основы теории протонного синхротрона: Учеб. пособие для студентов. — М.: МГУ, 1999.
3. *Kolokolchikov S.* [et al.]. Acceleration and crossing of transition energy investigation using an RF structure of the barrier bucket type in the NICA accelerator complex // IPAC2022. 2022. WEPOPT004. P. 1829–1831. DOI: 10.18429/JACoW-IPAC2022-WEPOPT004.
4. *Kolokolchikov S. D., Senichev Y. V.* Magneto-Optical Structure of the NICA Collider with High Transition Energy // Phys. Atom. Nuclei. 2021. V. 84. P. 1734–1742. DOI: 10.1134/S1063778821100185.

УДК 530.22, 530.24, 530.145.84, 530.145.85

Учет кулоновского взаимодействия в редких распадах B-мезонов

С. И. Манухов

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В настоящее время редкие полулептонные и сверхредкие лептонные распады B-мезонов активно изучаются на установках LHCb [1], CMS [2] и ATLAS [3] Большого адронного коллайдера и на установке Belle-II в японском ускорительном центре KEK [4]. В частности, установки LHCb и CMS измерили парциальные ширины редких распадов $B^0_{s,d} \to \mu^+\mu^-$, $B^0_{s,d} \to h^0l^+l^-$ (h^0 — нейтральный адрон). В настоящее время эти распады достаточно хорошо изучены теоретически в рамках Стандартной модели и ее расширений [5].

Однако известно существование расхождений между экспериментальными и теоретическими результатами. Прежде всего, это касается дифференциальных распределений таких распадов, как

$B^0 \to K^0 \mu^+ \mu^-$ [6], а также парциальной ширины распада $B^0_s \to \mu^+ \mu^-$ [1–3]. Именно благодаря этим расхождениям, изучение редких распадов B-мезонов считается чувствительным к «новой физике». Однако перед тем, как объявлять о выходе за пределы Стандартной Модели необходимо убедиться, что все возможные поправки к распадам в рамках СМ учтены верно.

Ключевая идея данной работы — учет кулоновского взаимодействия между заряженными лептонами в конечном состоянии при помощи изменения процедуры вторичного квантования. Обычно в квантовой теории поля используется разложение по плоским волнам. Однако плоские волны — это решения свободного волнового уравнения, то есть решения, предполагающие отсутствие взаимодействия между частицами. В тоже время, в рассматриваемых распадах B-мезонов в конечном состоянии присутствуют заряженные лептоны. Их нельзя считать свободными, потому что каждых из лептонов находится в поле другого лептона. Они взаимодействуют друг с другом кулоновским образом. Именно поэтому в работе используется модифицированная процедура вторичного квантования — разложение по точным решениям волнового уравнения с внешним потенциалом:

$$l(x) = \sum_{\lambda = \pm 1/2} \int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3} \left(a_{\mathrm{E_p},\mathbf{p}} \Psi^{(+)}_{E_p,\mathbf{p}}(x) e^{-iE^{(+)}t} + b^{\dagger}_{E_p,\mathbf{p}} \Psi^{(-)}_{E_p,\mathbf{p}}(x) e^{+iE^{(-)}t} \right).$$

Этот метод хорошо известен из атомной физики и носит название картины или представления Фарри [7]. Обоснование применимости метода Фарри было выполнено на примере распада гипотетической нейтральной псевдоскалярной частицы на два заряженных скаляра $B^0(M) \to S^+(m)S^-(m)$. Необходимость проверки обусловлена тем, что метод Фарри обычно применяется для атомных систем, в которых имеется связанное состояние электрона и ядра. Априори не ясно, на сколько адекватным является рассмотрение Фарри в случае системы взаимодействующих релятивистских несвязанных в конечном состоянии частиц. Для проверки метода Фарри необходимо провести сравнение с другими способами учета кулоновского взаимодействия. В данной работе производится сравнение трех подходов.

1) Нерелятивистского метода Гамова [8], Зоммерфельда [9] и Сахарова [10].
2) Точного релятивистского метода, основанного на построении двухчастичных релятивистских уравнений, формализм которых был развит Кратером (Crater) [11] и Саздjаном (Sazdjian) [12].
3) Релятивистского метода Фарри [7].

Сравнение трех методов изображено на рис. 1. Видно, что метод Фарри дает аналогичные предсказания, что и остальные методы, практически на всем интервале допустимых значений. Только возле границы m → M/2 (нерелятивистский предел) наблюдается расхождение между методами. Это сигнализирует о том, что в таких распадах метод Фарри не работает. Однако в релятивистском случае картина Фарри работает также, как и остальные подходы. Именно этот факт позволяет сделать предположение, что картина Фарри хорошо применима к описанию распадов с участием пар заряженных лептонов.

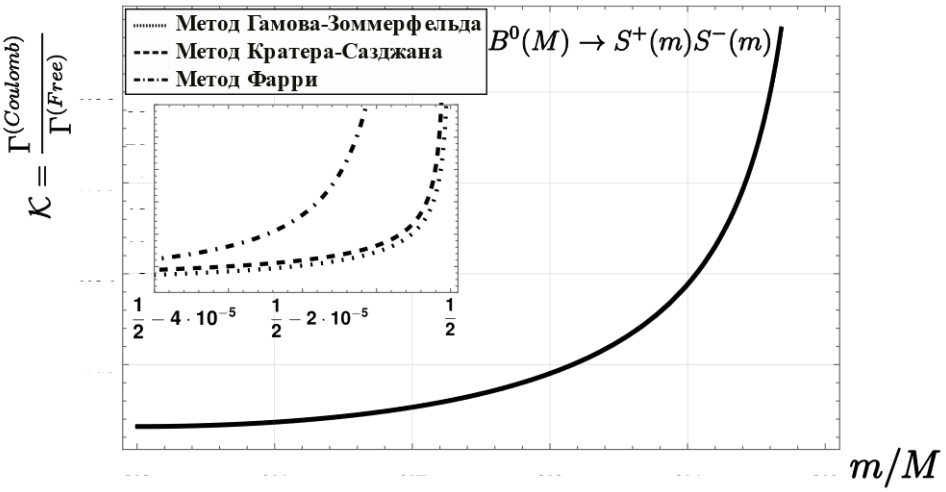


Рис. 1. График зависимости кулоновского фактора от соотношения масс m/M в распаде $B^0(M) \to S^+(m)S^-(m)$

Применение метода Фарри к распадам B-мезонов позволило рассчитать поправки в распадам $B^0_{s,d} \to l^+l^-$ и $B^0_{s,d} \to h^0l^+l^-$. Учет кулоновского взаимодействия в распаде $B^0_s \to \mu^+\mu^-$ уменьшает расхождение между теорией и экспериментом более, чем вдвое (оставляя 2% отклонения на фоне 11%-й экспериментальной погрешности). Также продемонстрировано, что кулоновская поправка может составлять

более 10% для распадов с участием тау-лептонов (например, в распаде $B^0_s \to f^0(1500)\tau^+\tau^-$). Без учета кулоновского взаимодействия подобные распады вообще не могут быть адекватно описаны.

Наконец, разработан универсальный рецепт, позволяющий учитывать кулоновское взаимодействие в любом распаде, в конечном (или начальном) состоянии которого есть пара заряженных лептонов:

$$\langle l^+l^-|\bar{l}(x)Ol(x)|0\rangle \xrightarrow[Coulomb]{} \langle l^+l^-|\bar{l}(x)Ol(x)|0\rangle \left|\frac{\Gamma\left(\sqrt{\frac{1}{4}-\alpha_{em}^2}+\frac{1}{2}+i\frac{\alpha_{em}}{v}\right)}{\Gamma\left(2\sqrt{\frac{1}{4}-\alpha_{em}^2}+1\right)}\right| exp\left(\frac{\pi\alpha_{em}\varepsilon_l}{2p_l}\right),$$

где O — оператор, представляющий из себя произвольную комбинацию γ-матриц, импульсов, а также кварковых и лептонных полей, ε_l, p_l — энергия и импульс заряженного лептона в системе покоя l^+l^- пары, $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера. По результатам работы подготовлена статья, которая была направлена в журнал ЭЧАЯ.

Литература

1. *Aaij R.* [et al.]. Measurement of the $B_s^0 \to \mu^+\,\mu^-$ branching fraction and effective lifetime and search for $B_s^0 \to \mu^+\,\mu^-$decays. // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118(19):191801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.191801
2. *Tumasyan A.* [et al.]. Measurement of the $B_s^0 \to \mu^+\,\mu^-$ decay properties and search for the $B_s^0 \to \mu^+\,\mu^-$ decay in proton-proton collisions at $\sqrt{s}$ = 13 TeV // Phys. Lett. B. 2023. V. 842:137955. DOI: 10.1016/j.physletb.2023.137955
3. *Aaboud M.* [et al.]. Study of the rare decays of B^0_s and B^0 mesons into muon pairs using data collected during 2015 and 2016 with the ATLAS detector // JHEP. 2019. V. 04:098. DOI: 10.1007/JHEP04(2019)098
4. *de Marino G.* [et al.]. Status and prospects for rare B decays at Belle and Belle II // PoS. 2023. FPCP2023:8. DOI: 10.22323/1.445.0008
5. *Buras A.J.* Theoretical review of B physics // Nucl. Instrum. Meth. A. 1995. V. 368. P. 1–20. DOI: 10.1016/0168-9002(95)00869-1
6. *Aaij R.* [et al.]. Differential branching fractions and isospin asymmetries of $B\to K^{(*)}\mu^+\mu^-$ decays // JHEP. 2014. V. 06:133. DOI: 10.1007/JHEP06(2014)133
7. *Furry W.H.* On bound states and scattering in positron theory // Phys. Rev. 1951. V. 81. P. 115–124. DOI: 10.1103/PhysRev.81.115
8. *Gamow G.* Zur Quantentheorie des Atomkernes // Zeitschrift fur Physik. 1928. V. 51. P. 204–212. DOI: 10.1007/BF01343196
9. *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. V. 2 — Los Angeles: F. Vieweg & Sohn, 1921.
10. *Сахаров А. Д.* Взаимодействие электрона и позитрона при рождении пар // ЖЭТФ. 1948. Т. 18. Вып. 7. С. 631–635.
11. *Crater H., Alstine P. V*. Two-body dirac equations // Annals Phys. 1983. V. 148(1). P. 57–94. DOI: 10.1016/0003-4916(83)90330-5
12. *Sazdjian H*. Relativistic wave equations for the dynamics of two interacting particles. // Phys. Rev. D. 1986. V. 33 P. 3401–3424. DOI: 10.1103/PhysRevD.33.3401

УДК 53.01

Изучение декогеренции в процессе комптоновского рассеяния запутанных аннигиляционных фотонов

***С. А. Мусин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Пара аннигиляционных фотонов, рожденных в процессе электрон-позитронной аннигиляции $e^+e^- \to \gamma\gamma$, может описываться только общей волновой функцией и находится в максимально запутанном поляризационном состоянии. Благодаря этому свойству, аннигиляционные фотоны являются уникальной системой для изучения квантовой запутанности и декогеренции в области энергий, на пять порядков, превышающих энергию оптических фотонов.

Максимальная запутанность аннигиляционных фотонов множество раз была доказана экспериментально по угловым азимутальным распределениям фотонов, полученных в процессе комптоновского рассеяния начальной пары. Однако процесс декогеренции изначально запутанной пары пока имеет теоретически противоречивое описание [1, 2], не согласующееся с экспериментальными результатами. Отметим,

что простейшим случаем декогерентности является промежуточное комптоновское рассеяние. Таким образом, в случае исследования аннигиляционных фотонов комптоновское рассеяние играет двойную роль: с его помощью измеряют поляризационные состояния фотонов в комптоновских поляриметрах, и оно же является процессом декогеренции.

Для экспериментального исследования процесса декогеренции в ИЯИ РАН была создана установка по изучению комптоновского рассеяния запутанных аннигиляционных фотонов [3]. Установка представляет собой источник аннигиляционных фотонов из позитронного источника ^{22}Na, помещенного в свинцовый коллиматор и двух плеч, в каждом из которых находятся 2 рассеивателя на оси коллиматора и 16 счетчиков рассеянных фотонов. Фотография плеча установки, фактически представляющего из себя 16 комптоновских поляриметров и предварительного рассеивателя, представлена на рис. 1.

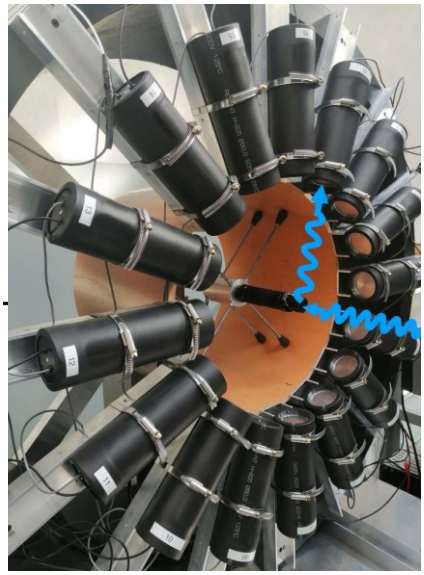


Рис. 1. Фотография плеча установки для изучения комптоновского рассеяния аннигиляционных фотонов в ИЯИ РАН. В центре плеча на оси установки установлены два, промежуточный и основной, рассеивателя из сцинтилляторов. Вокруг основного рассеивателя установлены 16 счетчиков рассеянных фотонов, образуя 16 комптоновских поляриметров. Синей линией обозначен путь фотона из источника

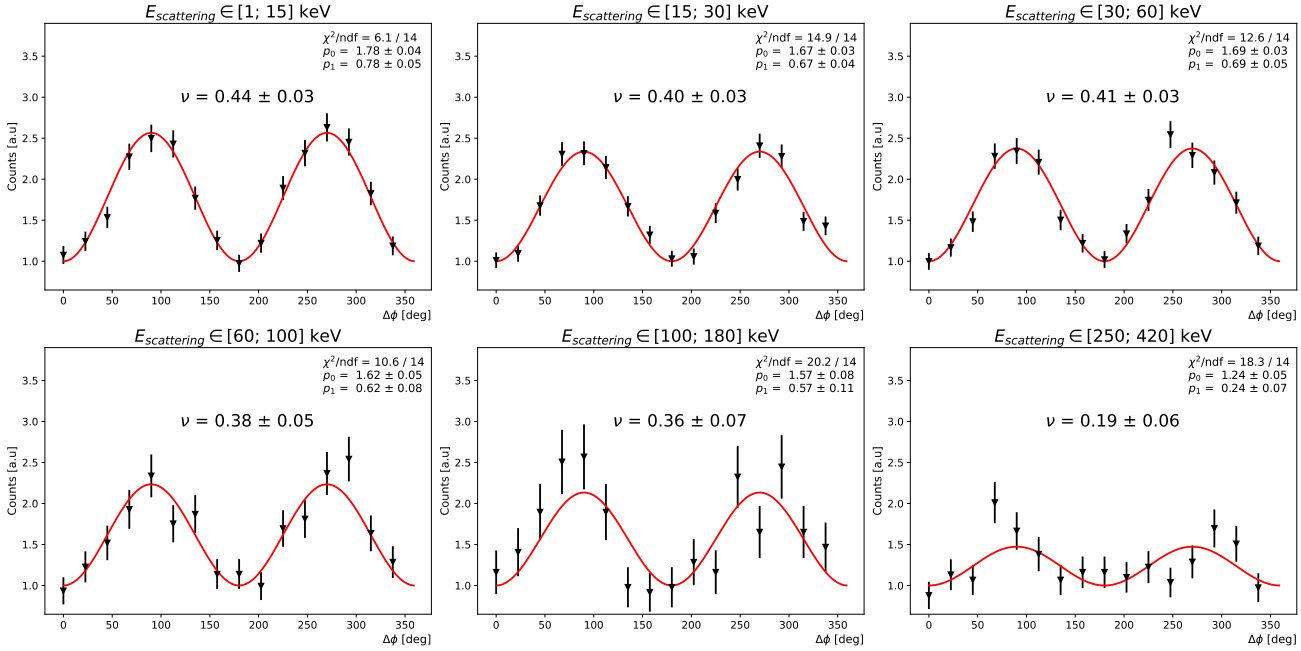


Рис. 2. Зависимость числа рассеянных пар фотонов от угла между направлениями импульсов рассеянных фотонов для различных энергий предварительного рассеяния. Красной кривой обозначены результаты аппроксимации этих данных теоретически ожидаемой функцией

Первые результаты, полученные на данной установке, не выявили отличий в угловых корреляциях между парами, испытавшими двойное (в основных рассеивателях) и тройное (включая промежуточный рассеиватель) комптоновское рассеяние. Целью данной работы было изучение угловых корреляций для различных энергий предварительного рассеяния одного из фотонов и поиск границы, при которой система теряет свойства запутанной. Результаты проведенного исследования представлены на рис. 2.

Из графиков зависимости числа рассеянных пар фотонов в зависимости от угла между импульсами рассеянных фотонов видно, что для энергий первого рассеяния до 100 кэВ величина угловых корреляций практически остается постоянной в пределах статистической точности. Первое значимое отличие наблюдается лишь для случая первого рассеяния на угол $180°$.

Геометрия установки не позволяет провести измерения в диапазоне углов первого рассеяния $50° - 160°$, вследствие чего не удается установить границу, при которой величина корреляции приближается к случаю классически скоррелированных фотонов. Однако при углах, меньших $50°$, не наблюдается отклонений величины угловых корреляций от случая запутанных фотонов, что является указанием на отсутствие мгновенного коллапса квантового состояния в процессе промежуточного комптоновского рассеяния.

Литература

1. *Hiesmayr B. C., Moskal P.* Witnessing Entanglement In Compton Scattering Processes Via Mutually Unbiased Bases // Sci Rep. 2019. V. 9(1): 8166.
2. *Caradonna P.* [et al.]. Probing entanglement in Compton interactions // J Phys Commun. 2019. V. 3(10): 105005.
3. *Abdurashitov D.* [et al.]. Setup of Compton polarimeters for measuring entangled annihilation photons // Journal of Instrumentation. 2022. V. 17(03): P03010.

УДК 53.01

Использование метода эффективного потенциала для анализа классических решений в модели Фридберга–Ли–Сирлина

***Э. С. Ким*[1], *Э. Я. Нугаев*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт ядерных исследований РАН

Локализованные решения нелинейных уравнений движения классической теории поля представляют собой уединенные волны, которые в физической литературе чаще называют солитонами. Эти объекты изучаются в непертурбативном режиме, поэтому являются интересными решениями для физиков-теоретиков. Они также встречаются в различных феноменологических моделях, связанных с космологией и физикой частиц. Существование солитонов может обеспечиваться двумя механизмами: топологическим и нетопологическим. Топологический механизм заключается в наличии у рассматриваемой теории нетривиальной структуры вакуума и существовании решений с сохраняющимся ненулевым топологическим зарядом [1]. Наличие в теории ненарушенной непрерывной внутренней симметрии с сохраняющимся зарядом Q и потенциалом комплексного скалярного поля специального вида приводит к существованию солитонов, называемых Q-шарами [2].

Модель Фридберга–Ли–Сирлина [3] с двумя скалярными полями является примером теории, содержащей как топологические, так и нетопологические солитонные конфигурации [4]. В данном докладе предлагается метод построения эффективного потенциала для модели Фридберга–Ли–Сирлина, который позволяет свести задачу к нахождению Q-шаров. Сравнение полученных результатов с численными решениями полной теории показывает, что эффективный потенциал воспроизводит нетопологические конфигурации модели. Особенностью теории с эффективным потенциалом в (1+1) измерениях является то, что она аналитически решаема. Для проверки численных результатов, полученных для топологических конфигураций в модели Фридберга–Ли–Сирлина была использована теория возмущений. В нулевом порядке теории возмущений было обнаружено связанное состояние бозонов на кинке, аналогично локализации фермионов на доменной стенке. Дальнейшие исследования будут посвящены возможности построения в модели Фридберга–Ли–Сирлина эффективного действия для учета кинетических членов теории и топологических конфигураций теории.

Литература

1. *Rajaraman R.* Solitons and Instantons: an Introduction to Solitons and Instantons In Quantum Field Theory. — Amsterdam: North-Holland, 1982.
2. *Coleman S.* Q-balls // Nucl.Phys.B. 1985. V. 262(2). P. 263–283.
3. *Friedberg R.* [et. al.]. Class of scalar-field soliton solutions in three space dimensions // Phys. Rev. D. 1976. V. 13(10). P. 2739–2761.
4. *Lensky V. A.* [et. al.]. Domain walls carrying a U(1) charge // J. Exp. Theor. Phys. 2001. V. 93. P. 677–684.

Секция «ИТЭР — шаг в энергетику будущего»

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

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

Секретарь: И. М. Позняк (к. ф.-м. н.)

Дата: 05.04.2024 Время: 10:00

УДК 533.922

Машинное обучение для нейтронной эмиссионной томографии в реальном времени с использованием сигналов диагностики вертикальная нейтронная камера ИТЭР

***А. С. Жаров*[1,2], *Г. Е. Немцев*[1,2], *Т. М. Кормилицын*[1,2], *Р. Н. Родионов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

Вертикальная нейтронная камера (ВНК), одна из ключевых систем нейтронной диагностики токамака ИТЭР, предназначена для измерения и восстановления профиля нейтронного источника плазмы с заданным временным и пространственным разрешением. Реконструкция параметров нейтронного излучения в режиме реального времени позволит не только изучать процессы, происходящие в плазме во время разряда, но и контролировать их.

Основной проблемой существующих методов плазменной томографии (метод максимального правдоподобия [1], регуляризация по Тихонову [2]) является их вычислительная сложность, существенно затрудняющая выполнение требований, установленных для нейтронных диагностик токамака ИТЭР. Алгоритмы машинного обучения (ML) могут быть рассмотрены как потенциальное решение для онлайн томографии нейтронного источника. Особенность метода заключается в разделении процессов аппроксимации и предсказания. После обучения ML-модели способны восстанавливать сотни объектов в секунду, тем самым делая возможным их применение в режиме реального времени.

В работе продемонстрирована возможность использования методов машинного обучения для восстановления интегральных (полная интенсивность нейтронного излучения и полная термоядерная мощность) и пространственных (профиль интенсивности нейтронного излучения и профиль плотности термоядерной мощности) характеристик нейтронного источника. Методы линейной регрессии и градиентного бустинга восстановили полную интенсивность DD-нейтронов и DT-нейтронов, а также полную термоядерную мощность со средней абсолютной процентной ошибкой (MAPE) менее 10% за 1 мс. Деконволюционная нейронная сеть реконструировала профили интенсивности DD- и DT-нейтронного излучения в высокоинтенсивных сценариях плазмы ИТЭР с ошибкой в 10% примерно за 5 мс.

ИТЭР — это ядерная установка INB № 174. Взгляды и мнения, выраженные в данной работе, могут не отражать точку зрения международной организации ИТЭР.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № Н.4а.241.19.23.1014 от 18 января 2023 г. на выполнение научно-исследовательской и опытно-конструкторской работы «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2023 году».

Литература

1. *Rodionov R., Nemtcev G., Krasilnikov A.* Fusion neutron emissivity tomography for ITER Vertical Neutron Camera // Nucl. Instrum. Meth. A. 2022. V. 1040: 167127.
2. *Iwama N.,* [et al.]. Phillips–Tikhonov regularization of plasma image reconstruction with the generalized cross validation // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54(6). P. 502–504.

УДК 533.9.08

Определение положения шнура плазмы в токамаке МИФИСТ-0 на начальной стадии разряда

А. В. Николаева, А. С. Пришвицын, И. И. Пашков, С. А. Крат

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Университетский токамак МИФИСТ-0 создан в качестве учебно-демонстрационной площадки для подготовки высококвалифицированных кадров в области управляемого термоядерного синтеза и является хорошей возможностью для студентов получить практические навыки работы на установке, приближенной по своим свойствам к крупным исследовательским токамакам. При этом сам процесс создания и оснащения токамака, происходящий с активным привлечением студентов, также решает задачу подготовки новых кадров [1]. Одним из примеров подобных работ является создание и поэтапное улучшение системы электромагнитных диагностик.

Электромагнитные диагностики часто применяются на токамаках для определения таких параметров плазмы как ток плазмы, положение плазменного шнура, его форма и др. На основе данных о магнитном поле, создаваемом в ходе эксперимента, можно получить информацию о характеристиках плазменного шнура [2]. Целью данной работы является создание, калибровка и испытание однокомпонентных электромагнитных зондов (катушек Мирнова) в комплексе с другими диагностиками — поясом Роговского и петлями измерения напряжения на обходе. В результате была успешно апробирована методика, позволяющая определить положения плазменного шнура, созданного в ходе экспериментов на токамаке МИФИСТ-0.

Был создан и размещен комплекс из восьми магнитных зондов (четыре снаружи разрядной камеры и четыре внутри). С помощью использования приведенных ниже общеизвестных формул, были восстановлены зависимости положения плазменного шнура от времени [3]. Упомянутые формулы для определения вертикального и горизонтального смещения соответственно имеют следующий вид:

$$\Delta z = \frac{B_{\text{в}} - B_{\text{н}}}{B_{\text{в}} + B_{\text{н}}} h = \frac{\int \left(\frac{U_{\text{в}}}{S_{\text{эф}_{\text{в}}}} - \frac{U_{\text{н}}}{S_{\text{эф}_{\text{н}}}} \right) dt}{\int \left(\frac{U_{\text{в}}}{S_{\text{эф}_{\text{в}}}} + \frac{U_{\text{н}}}{S_{\text{эф}_{\text{н}}}} \right) dt} h, \tag{1}$$

$$\Delta R = \frac{(\Psi_2 - \Psi_1) - 2\pi \cdot d \cdot (R_1 \cdot B_1 + R_2 \cdot B_2)}{2\pi \cdot (R_1 \cdot B_1 - R_2 \cdot B_2)}, \tag{2}$$

где $U_{\text{в}}$ и $U_{\text{н}}$ — сигналы с верхней и нижней катушки Мирнова соответственно (катушки МР-1 и МР-3 на рис. 1*а* соответственно), $S_{\text{эф_в}}$ и $S_{\text{эф_н}}$ — эффективные площади верхней и нижней катушки, R_1, R_2 — радиусы петель напряжения на обходе (рис. 1*б*), B_1, B_2 — локальное магнитное поле, измеренное магнитными зондами 2 и 4 соответственно (рис. 1*б*), Ψ_1, Ψ_2 — полоидальные магнитные потоки через внутреннюю и внешнюю петли напряжения на обходе соответственно, d — расстояние от зонда до середины отрезка, соединяющего пару зондов Мирнова.

Стоит отметить, что пояс Роговского используется для определения и последующего вычитания тороидальной компоненты магнитного поля, влияющей на корректность получаемых результатов.

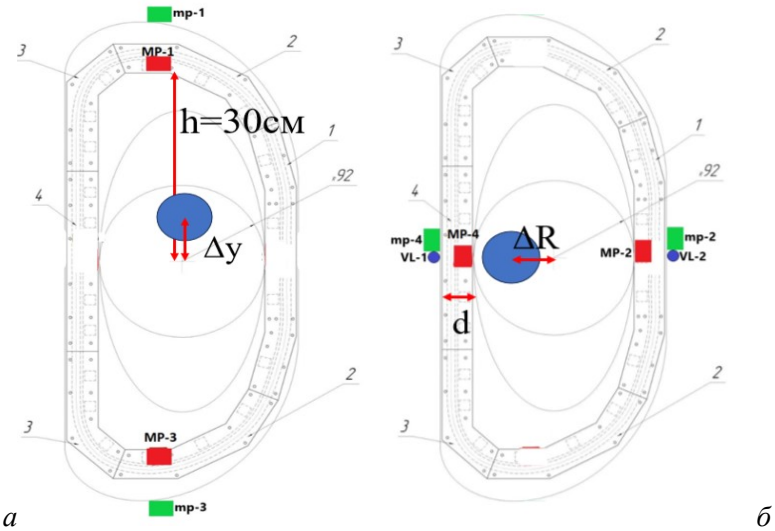
Также в рамках описанной работы были измерены эффективные площади созданных зондов, они указаны в табл. 1.

Таблица 1. Параметры внутрикамерных однокомпонентных зондов

Номер зонда	S_{eff}^{in}, см^2
1	217
2	107
3	180
4	143

Описанные зонды и методика определения параметров плазменного шнура будут использованы в дальнейших экспериментах на установке МИФИСТ-0 как важное дополнение общей системы диагностик

токамака. На данном этапе этот метод позволил определить положение плазменного шнура на начальных этапах разряда в токамаке МИФИСТ-0.



а *б*

Рис. 1. Расположение электромагнитных диагностик для определения: *а* — вертикального смещения плазменного шнура; *б* — горизонтального смещения плазменного шнура

Литература

1. *Krat S.* [et al.]. MEPhIST-0 Tokamak for Education and Research // Fusion Science and Technology. 2023. V. 79(4). P. 446-464. DOI: 10.1080/15361055.2022.2149033.
2. *Гришина И. А.* Актуальные направления развития исследований по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу в России в 2021 году (Обзор материалов XLIX Международной Звенигородской конференции по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу, 14–18 марта 2022 г.) // Успехи прикладной физики. 2022. Т. 10. № 3. С. 234–255. DOI: 10.51368/2307-4469-2022-10-3-234-255.
3. *Изарова А. Д.* [и др.]. Кольцевой лимитер токамака «МИФИСТ-0» // Лазерные, плазменные исследования и технологии. ЛАПЛАЗ-2022: Сборник научных трудов VIII Международной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения лауреата нобелевской премии по физике Николая Геннадиевича Басова. 2022. С. 136.

УДК 533.922

Исследование динамики теплового воздействия мощного потока водородной плазмы на поверхность вольфрамовой мишени с предварительно напыленным слоем висмута

***А. В. Пушина*[1,2], *Д. А. Бурмистров*[1,3], *С. В. Карелов*[1], *С. Д. Лиджигоряев*[1,2], *И. М. Позняк*[1,2], *Д. А. Топорков*[1,2]**

[1]ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Национальный исследовательский университет «МЭИ»

Защита материалов от воздействия мощных плазменных потоков представляет несомненный интерес для решения широкого класса фундаментальных и прикладных задач. В том числе для повышения эксплуатационных характеристик обращенных к плазме элементов токамака и верификации расчетно-теоретических моделей, описывающих поведение защитных покрытий под действием интенсивных плазменных потоков в условиях ИТЭР. Помимо существующего эффекта экранировки материалов за счет их испарения и образования защитного плазменного слоя [1], продолжается поиск и исследование способов дополнительного снижения тепловой нагрузки на защитные покрытия, например — с помощью азотной газовой завесы перед поверхностью [2]. В данной работе, выполненной на установке МК-200 (ГНЦ РФ ТРИНИТИ), в качестве защитного материала использовался тонкий слой предварительно напыленного на вольфрам висмута, материала с относительно низкими температурами плавления и кипения, но с большим атомным номером. Для исследования эффективности такого метода получены экспериментальные

данные о динамике температуры поверхности мишени с висмутом, а также определена плотность поглощаемого этой мишенью теплового потока.

Схема экспериментов на установке МК-200 представлена на рис. 1. Плазменный поток со скоростью $(4\div6)\times10^7$ см·с$^{-1}$, энергосодержанием ≈ 50 кДж и длительностью ≈ 15 мкс создавался импульсным электродинамическим ускорителем. В качестве плазмообразующего газа использовался водород. Плазменный поток транспортировался в продольном магнитном поле с индукцией 1÷2 Тл. В экспериментах использовалась вольфрамовая мишень с размерами 30 × 30 мм и толщиной 3 мм, на которую предварительно был напылен слой висмута толщиной 7.5 мкм. Регистрация температуры в процессе воздействия потока плазмы на мишень проводились методом инфракрасной спектральной пирометрии. Для измерения плотности поглощенной мишенью энергии использовался термопарный калориметр. Далее приводятся результаты измерений температуры поверхности мишени с висмутом и результаты вычислений плотности поглощенного теплого потока.

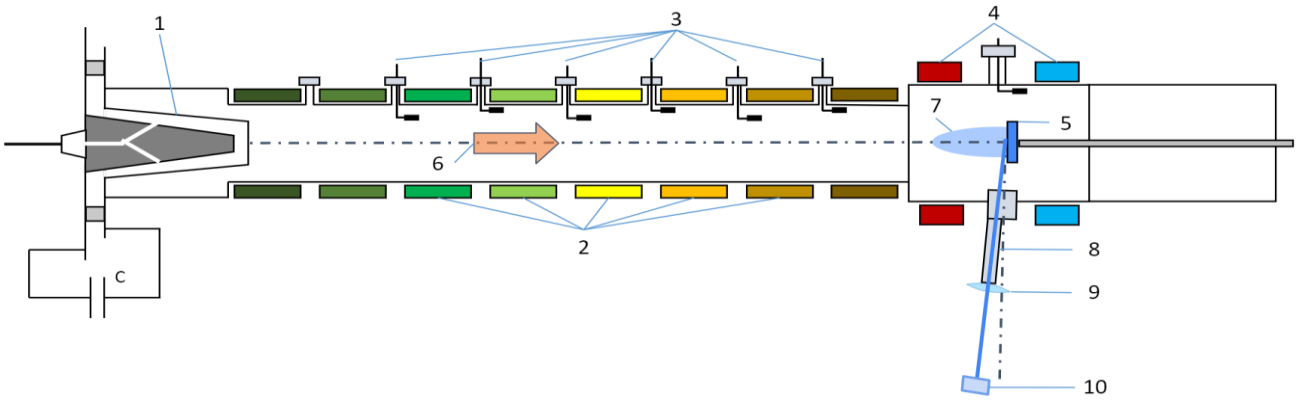


Рис. 1. Схема эксперимента для измерения температуры поверхности мишени: *1* — импульсный плазменный ускоритель; *2* — катушки магнитного поля; *3* — магнитные зонды; *4* — катушки Гельмгольца; *5* — вольфрамовая мишень; *6* — плазменный поток; *7* — мишенная плазма; *8* — система патрубков; *9* — линза; *10* — пирометр

В ходе вычисления плотности поглощенного теплового потока определялось количество испаренного материала для каждого из 17 последовательно выполненных экспериментов и получена зависимость толщины слоя висмута от количества проведенных экспериментов (рис. 2). Средняя эрозия висмута за один импульс составила ≈ 0,5 мкм. Это значение согласуется с экспериментальным фактом полного испарения висмута с вольфрама на 17-м пуске.

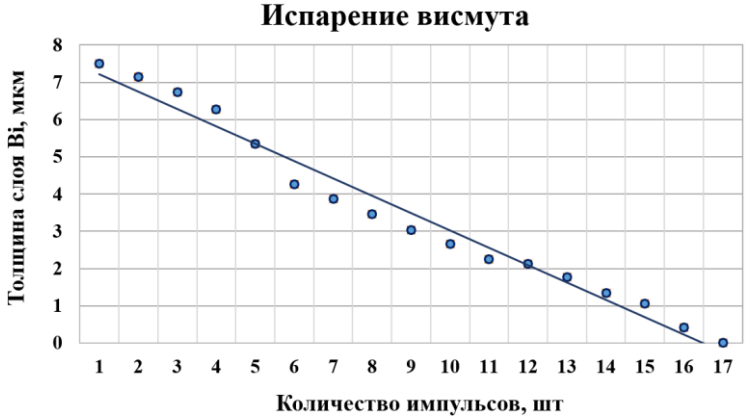


Рис. 2. Толщина слоя висмута для 17 последовательно выполненных экспериментов

На рис. 3 представлена динамика плотности теплового потока, поглощенного мишенью с висмутом толщиной 7.5 мкм, измеренная температура поверхности висмута и вычисленная температура на границе висмут/вольфрам. При плотности энергии плазменного потока 800 Дж/см^2 плотность поглощенной мишенью энергии составляла 12 Дж/см^2. Максимально достигнутая вольфрамом температура составляла 1620 К, что значительно меньше его температуры плавления 3695 К.

В работе [2] были представлены результаты экспериментов по защите вольфрама газовой завесой: при напуске струи азота перед поверхностью вольфрамовой мишени плотностью ≈ $2\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ поглощенная энергия составляла 17 Дж/см^2, при отсутствии газовой завесы 47 Дж/см^2. Из сравнения следует, что по таким параметрам, как плотность поглощенной энергии и максимально достигаемая во время воздей-

ствия температура вольфрама, слой висмута толщиной ≥ 0.5 мкм более эффективно снижает тепловую нагрузку на вольфрамовую мишень и препятствует не только испарению вольфрама, но и его плавлению, что, в свою очередь, значительно уменьшает возможность образования трещин на вольфраме после воздействия плазменного потока.

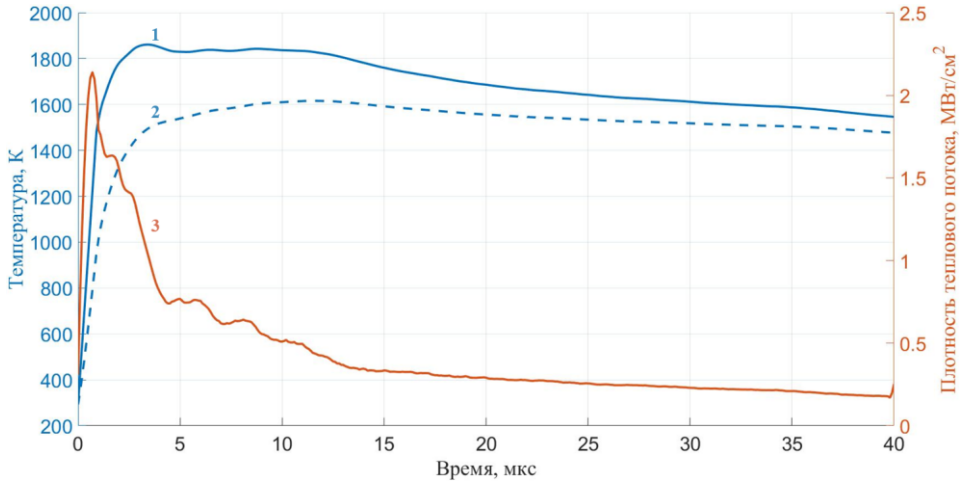


Рис. 3. Измеренная температура поверхности висмута (*1*), вычисленная температура на границе висмут/вольфрам (*2*) и плотность поглощенного мишенью теплового потока (*3*)

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках научного проекта РФФИ № 20-21-00153.

Литература

1. *Ibano K.* [et al.]. Estimation of suppressed erosion by vapor shielding at Be and W walls under transient loads // Nuclear Fusion. 2019. V. 59:076001.
2. *Лиджигоряев С. Д.* [и др.]. Защита вольфрамовой мишени от воздействия мощного потока водородной плазмы с помощью азотной газовой завесы // ВАНТ. 2023. Т. 46. № 2. С. 63–71.

УДК 621.039.63

Расчетное исследование работоспособности сборки гибкой опоры бланкета ИТЭР в аварийном режиме работы

***Б. И. Никулин*[1], *И. И. Поддубный*[1], *М. Н. Свириденко*[1], *А. Б. Путрик*[2]**

[1]АО «НИКИЭТ»
[2]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

Бланкет реактора ИТЭР состоит из 440 модулей бланкета (МБ), каждый из которых закреплен на вакуумной камере (ВК) с помощью 4х сборок гибких опор (ГО), главным элементом которых является картридж, представляющий собой полый цилиндр с двумя фланцами: нижний соединяется с корпусом ВК, верхний — с защитным блоком (ЗБ). Для обеспечения электрической изоляции ГО от ВК используется электроизоляционное покрытие (ЭИП) на базе оксида алюминия.

Нормальный режим работы реактора представляет собой периодическую последовательность режимов импульса с нейтронным потоком на внутрикамерные компоненты в течение 450 с и паузы с нулевым энерговыделением в течение 1800 с (режим Inductive I). В данном режиме максимальная температура в сборке ГО достигает 189 ºС в центральном болте, тогда как в максимальная температура в картридже — 156 ºС.

При срывах плазмы в МБ индуцируются знакопеременные электромагнитные силы, действующие на картридж в осевом направлении, величиной, лежащей в диапазоне 500-600 кН, для двух сценариев срыва плазмы типа Fast VDE II в течение 36 мс и типа Slow VDE III в течение 300 мс. Расчет напряженно-деформированного состояния (НДС) картриджа с учетом комбинации нагрузок в режимах Inductive I и Fast VDE II показал, что конструкция картриджа удовлетворяет нормам статической и циклической прочности SDC-IC.

По требованию МО ИТЭР предварительное усилие затяга болта может варьироваться в диапазоне 600–1200 кН. Расчет НДС сборки ГО показал падение осевого усилия в режиме Inductive I с 600 кН до 504 кН, что при действии осевой силы 600 кН приводит к раскрытию стыка на интерфейсе «коническая втулка-картридж», из-за чего при циклическом режиме работы реактора существует вероятность разрушения ЭИП и прохождения тока через опору.

В режиме Slow VDE III максимальная сила тока достигает 137 кА. Омический нагрев, превышающий нейтронный на 4 порядка, в течение 300 мс приводит к сильному локальному возрастанию температуры картриджа до 966ºС и среднему разогреву спиц до 600ºС. Остывание картриджа до рабочих температур происходит за 1500 с при учете лучистого теплообмена между картриджем ГО и посадочным гнездом ВК.

Протекание тока по спицам картриджа индуцирует собственное магнитное поле и поперечные электромагнитные силы (<250 Н), однако их, влияние на общее НДС незначительно. В свою очередь, величина поперечных сил, индуцированных тороидальной компонентой магнитного поля реактора со значением до 9 Тл, достигает 12,6 кН на одной спице, что сопоставимо с силой, приводящей к потере устойчивости картриджа в поперечном направлении.

Высокие температуры в течение длительного времени приводят к действию значительных термических напряжений, деградации теплофизических и механических свойств, что вкупе с индуцированными электромагнитными силами, действующими на спицы картриджа, могут привести к потере устойчивости картриджа, поэтому необходимо обеспечить предварительное усилие затяга болта сборки ГО, заведомо гарантирующее условие нераскрытия стыка на интерфейсе «коническая втулка-картридж».

Работа выполнена в рамках договора № 71-26 до от 16 июня 2021 г между «ИТЭР-Центр» (Заказчик) и АО «НИКИЭТ» (Исполнитель), государственные контракты с ГК «Росатом» от 11.05.2021 г. № Н.4а.241.19.21.1038, от 14.02.2022 г. № Н.4а.241.19.22.1123 и от 18.01.2023 г. № Н.4а.241.19.23.1014.

УДК 533.9.082.5

Моделирование влияния эффектов гало и cross-section на работу активной спектроскопической диагностики на установке ИТЭР

***Г. С. Павлова*[1,2], *С. В. Серов*[3], *С. Н. Тугаринов*[2], *А. Ю. Шабашов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»
[3]МО ИТЭР

Для измерения параметров плазмы на токамаке ИТЭР планируется применять несколько десятков диагностик, в том числе активную спектроскопическую диагностику CXRS (Charge eXchange Recombination Spectroscopy) Edge [1, 2], которая разрабатывается в России. Активная спектроскопия (АС) [3, 4] позволяет определять параметры высокотемпературной плазмы с помощью анализа спектра излучения, возникающего при прохождении диагностического пучка через плазму.

Когда высокоэнергетический пучок атомов (например, атомов водорода Н) инжектируется в плазму токамака, полностью ионизованные легкие примеси и изотопы водорода плазмы перезаряжаются на атомах пучка, в результате чего получают электрон и впоследствии излучают линейчатый спектр. Это излучение из разных точек наблюдения вдоль пути прохождения пучка через плазму с помощью системы сбора света передается на входы спектрометров. Т. н. спектральные линии активной перезарядки имеют заметное доплеровское уширение, по которому можно определить температуру плазмы в точке пересечения пучка и линии наблюдения. Также, из-за эффекта Доплера, центр спектральной линии будет сдвинут, и по этому сдвигу определяется скорость вращения плазмы. Интенсивность спектральной линии пропорциональна концентрации излучающих ионов в плазме. Таким образом, с помощью АС можно определить концентрацию примесей в плазме, ионную температуру и скорость вращения плазмы.

На форму и положение наблюдаемой спектральной линии могут повлиять разные физические явления, что приводит к возникновению дополнительных погрешностей определения параметров плазмы. Эта работа посвящена моделированию двух эффектов — гало пучка [5] и влиянию зависимости эффективного скоростного коэффициента перезарядки от энергии взаимодействия (в англоязычной литературе этот эффект называется cross-section effect) [6].

Гало пучка — это облако атомов водорода, движущихся с тепловыми скоростями, которое образуется вокруг пучка при его прохождении через плазму в результате перезарядки ионов водорода плазмы

на атомах пучка. Ионы плазмы тоже могут перезаряжаться на атомах гало, что приводит к увеличению интенсивности наблюдаемой спектральной линии активной перезарядки. На рис. 1 показаны смоделированные в коде FIDASIM [7] спектры излучения прямой перезарядки, возникающего при перезарядке ионов плазмы на атомах пучка, и излучения гало, возникающего при перезарядке ионов плазмы на атомах гало.

В случаях, когда температура плазмы существенна, становится заметным влияние эффекта cross-section. Так как эффективный скоростной коэффициент перезарядки зависит от энергии столкновения атома пучка и иона плазмы, для ионов плазмы, движущихся в том же направлении, что и атомы пучка, вероятность перезарядиться на них и излучить фотон отличается от этой вероятности для ионов, движущихся в другом направлении или с другой тепловой скоростью. Это вызывает искажение наблюдаемой спектральной линии, что в свою очередь может привести к некорректному определению параметров плазмы. На рис. 1 видно, что уширение и сдвиг спектральной линии прямой перезарядки отличаются от уширения и сдвига спектральной линии гало, т.к. спектральная линия прямой перезарядки искажается из-за эффекта cross-section. В результате параметры плазмы, определенные по наблюдаемой спектральной линии, которая является суммой излучения прямой перезарядки и гало, будут отличаться от реальных параметров плазмы.

Для оценки влияния описанных эффектов на точность измерения параметров плазмы АС диагностикой на ИТЭР было проведено моделирование с использованием кодов SOS [8] и FIDASIM. Эти коды обладают разным функционалом и используют разные модели для расчетов спектров с учетом влияния на них эффекта гало и эффекта cross-section. По результатам анализа моделирования был сделан вывод, что код FIDASIM больше подходит для оценки влияния этих эффектов на работу АС на ИТЭР, т.к. учитывает больше процессов при расчетах (например, перезарядку ионов плазмы на атомах гало с электронами на энергетических уровнях выше второго). С его помощью было оценено влияние эффектов гало и cross-section на наблюдаемые параметры плазмы. Было показано, что в самых тяжелых случаях (для спектральной линии D ближе к центру плазменного шнура) эффект cross-section приводит к увеличению наблюдаемой скорости на 100 км/с (67%) и понижению наблюдаемой температуры на 1 кэВ (8%), а максимальный вклад эффекта гало в интенсивность наблюдаемой спектральной линии составляет 70% (для спектральной линии D, точка наблюдения с нормированным радиусом плазменного шнура ρ=0.85).

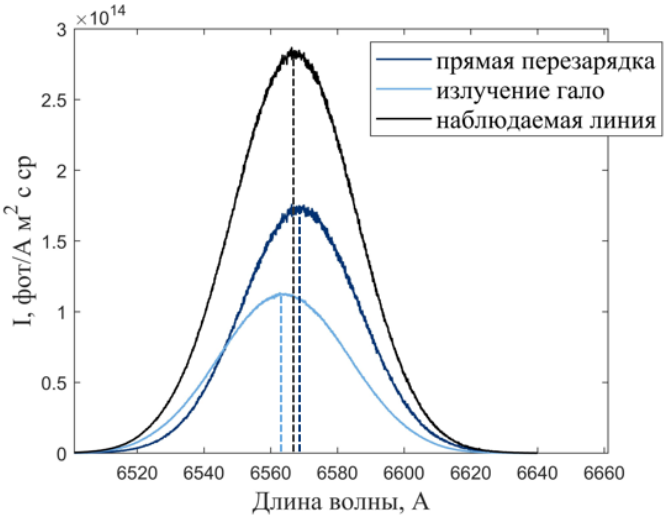


Рис. 1. Спектр излучения прямой перезарядки, спектр излучения гало и их сумма - наблюдаемая спектральная линия активной перезарядки (моделирование в FIDASIM для CXRS Edge на ИТЭР, D-alpha, нормированный радиус точки наблюдения ρ=0.5)

Работа выполнена в соответствии с государственным контрактом от 18.01.2023 № Н.4а.241.19.23.1014 «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2023 году».

Литература

1. *Тугаринов С. Н.* [и др.]. Разработка концепции активной спектроскопической диагностики с использованием диагностического пучка атомов, применительно к установке ИТЭР // Физика плазмы. 2004. Т. 30. № 2. С. 147–154.
2. *Serov S. V.* [et al.]. Measurement performance assessment for the ITER CXRS Edge diagnostic system // Rev. Sci. Instrum. 2021. V. 92: 053517.

3. *Fonck R. J., Darrow D. S., Jaehnig K. P*. Determination of plasma-ion velocity distribution via charge-exchange recombination spectroscopy // Phys. Rev. A. 1984. V. 29(6). P. 3288–3309.
4. *Isler R. C.* An overview of charge-exchange spectroscopy as a plasma diagnostic // Plasma Phys. Controlled Fusion. 1994. V. 36. P. 171–208.
5. *Hogan J. T.* Calculation of hydrogen density in toroidal plasma // J. Nucl. Mater. 1982. V. 111–112. P. 413–419.
6. *Howell R. B.* [et al.]. Corrections to charge exchange spectroscopic measurements in TFTR due to energy-dependent excitation rates // Rev. Sci. Instrum. 1988. V. 59. P. 1521–1523.
7. *Geiger B*. [et al.]. Progress in modelling fast-ion D-alpha spectra and neutral particle analyzer fluxes using FIDASIM // Plasma Phys. Controlled Fusion. 2020. V. 62: 105008.
8. *Von Hellermann M.* [et al.]. Simulation of Spectra Code (SOS) for ITER Active Beam Spectroscopy // Atoms. 2019. V. 7: 30.

УДК 539.1.074.3

Применение спектрометра на основе кристалла $LaCl_3$ в качестве монитора нейтронного выхода калибровочного источника ИТЭР

***Д. С. Фридрихсен*[1,2], *Т. М. Кормилицын*[1,2], *А. В. Панкратенко*[1,2], *С. Ю. Обудовский*[1], *Ю. А. Кащук*[1,2]**

[1]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Одной из нейтронных диагностик строящегося токамака-реактора ИТЭР, разработкой которых занимается Россия, является диверторный монитор нейтронного потока (ДМНП). Диагностика ДМНП служит для измерения локального потока быстрых нейтронов, полного нейтронного выхода и определения мощности термоядерной реакции в широком динамическом диапазоне. ДМНП будет располагаться под дивертором кассетой и в непосредственной близости к плазме. Проведение абсолютной калибровки планируется методом *in situ*, путем размещения в вакуумной камере токамака компактных источников нейтронного излучения: DD- и DT-нейтронных генераторов производства ВНИИА им. Н. Л. Духова. Максимальный выход генераторов составляет ~10^9 и ~10^{11} н/с, соответственно. Для контроля полного нейтронного выхода генераторы будут оснащены мониторами нейтронного потока. Большой вклад в точность калибровки детекторных узлов ИТЭР внесет правильный подбор и предварительная калибровка мониторов, которыми будут оснащены нейтронные генераторы. Модель конструкции, которая будет расположена внутри вакуумной камеры токамака для *in situ* калибровки нейтронных диагностик ИТЭР, представлена на рис. 1.

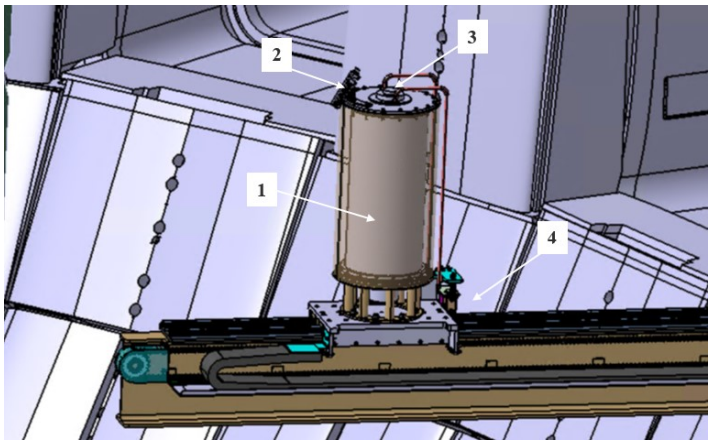


Рис. 1. 3D-модель системы позиционирования НГ: *1* — генератор; *2* — монитор нейтронного потока; *3* — мишень НГ; *4* — система позиционирования [1]

В качестве монитора-спектрометра, в дополнение к борному счетчику, для DD-генератора нейтронов рассматривается детектор на основе неорганического сцинтилляционного кристалла хлорида лантана, легированного церием, $LaCl_3$(Ce). Возможность использования такого кристалла для регистрации быстрых DD-нейтронов (~2.5 МэВ) была исследована и продемонстрирована в предыдущих работах [2]. Основными преимуществами этого сцинтиллятора являются высокий световыход и классическая форма функции отклика при регистрации нейтронов, соответствующая гауссову распределению. Собственный альфа-фон кристалла позволяет оперативно проводить корректирующую калибровку при незначительных изменениях

параметров измерительного тракта. Благодаря более низкой, в сравнении с органическими сцинтилляторами, чувствительности к DD-нейтронам появляется возможность разместить монитор в непосредственной близости к мишени генератора, закрепив детекторный узел на переднем фланце корпуса.

В данной работе представлена методика абсолютной калибровки нейтронного спектрометра на основе кристалла $LaCl_3$. Калибровка энергетической шкалы и определение абсолютной эффективности сцинтилляционного детектора $LaCl_3(Ce)$ проводилась на эталонном источнике DD-нейтронов во ВНИИМ им. Д. И. Менделеева. На стенде нейтронной диагностики АО "ГНЦ РФ ТРИНИТИ" отрабатывалась методика калибровки с использованием нейтронных генераторов с запаянной трубкой и «толстой» мишенью, а также с помощью образцовых спектрометрических гамма-источников для определения p/β- и α/β -отношений. По результатам измерений была проведена независимая оценка сечения реакции $^{35}Cl(n,p)^{35}S_{g.s}$, используемой для регистрации DD-нейтронов. Проведен анализ полученных результатов и выполнено сравнение данных из базы ENDF [3] и опубликованных в работах [4, 5]. Результаты проверочных измерений плотности потока с помощью ионизационных камер деления из состава диагностики ДМНП находятся в согласии с полученными с помощью монитора НГ оценками.

Коллектив авторов выражает благодарность Моисееву Н.Н. за организацию и помощь в работе с эталонным источником DD-нейтронов во ВНИИМ им. Д.И. Менделеева.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № Н.4а.241.19.23.1014 от 18 января 2023 года на выполнение научно-исследовательской и опытно-конструкторской работы «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2023 году».

Литература

1. *Mariano G.* [et al.]. Monte Carlo Simulations for ITER Neutron Diagnostics // 15th ITER Neutronics Meeting and Fusion Neutronics Workshop. 2024.
2. *Kormilitsyn T. M.* [et al.]. Novel LaCl3(Ce)-based spectrometer for deuterium plasma neutron diagnostics // Review of Scientific Instruments. 2021. V. 92(4): 043528.
3. *Brown D. A.* [et al.]. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data // Nucl. Data Sheets. 2018. V. 148. P. 1–142.
4. *Batchelder J. C.* [et al.]. Possible evidence of nonstatistical properties in the $^{35}Cl(n,p)^{35}S$ cross section // Physical Review C. 2019. V. 99(4): 044612.
5. *Kuvin S. A.* [et al.]. Nonstatistical fluctuations in the $^{35}Cl(n,p)^{35}S$ reaction cross section at fast-neutron energies from 0.6 to 6 MeV // Physical Review C. 2020. V. 102(2): 024623.

УДК 533.9.082.7

Использование расчетного кода OpenMC для моделирования нагрузки на конструкционные элементы токамака

Е. С. Афанасенко, Д. В. Портнов

Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

В работе рассматривается открытый программный код OpenMC [1], как возможная альтернатива расчетному коду MCNP [2], в настоящее время применяемому для расчета радиационных нагрузок в ИТЭР [3]. OpenMC можно использовать для предварительных оценок, поиска потерянных частиц, расчета весовых окон (variance reduction) и аналогичных задач. Данный расчетный код содержит необходимый для перечисленных задач функционал; основан на высокопроизводительных технологиях; структура проекта, стиль, инженерные решения соответствуют всем современным стандартам; взаимодействие с кодом осуществляется через Python. Важно отметить, что OpenMC доступен как открытый исходный код — это позволяет, если потребуется, самостоятельно доработать код в тех аспектах, которые необходимы для решения конкретных задач. В настоящее время только официально проект насчитывает более 100 разработчиков из многих стран мира, включая Китай и Россию.

Основной проблемой при применении OpenMC как альтернативы MCNP, является необходимость поддержания эквивалентных моделей для MCNP и OpenMC. Что касается геометрии, то существует несколько решений для прямого и обратного преобразования расчетных моделей MCNP <-> OpenMC, а также OpenMC <-> CAD <-> MCNP. Эти решения еще требуют доработки и тестирования, но, в основном, проблему поддержки синхронизации расчетных моделей можно считать практически решенной.

Основной предпосылкой для реализации таких конвертеров является идентичная логика представления данных в формате CSG спецификации как в MCNP, так и в OpenMC.

Стоит отметить проблему с синхронизацией спецификации нейтронного источника. Существующие пути реализации параметрического источника нейтронов для токамака являются хорошей основой, но пока не позволяют адекватно и в полной мере определить характеристики источника в виде термоядерной плазмы. Для решения этой проблемы было разработано программное обеспечения для генерации нейтронного источника в двух вариантах:

из данных с распределением температуры и концентрации ионов ($n_i(\Psi)$, $T_i(\Psi)$) в зависимости от координаты магнитной поверхности Ψ и параметров, задающих распределение магнитных поверхностей в пространстве. Для расчета интенсивности нейтронного источника используется параметризация скорости реакций из [4];

из рассчитанного другими средствами распределения нейтронного источника I (R, Z).

С помощью разработанного ПО получено детальное описание нейтронного источника, используемого в OpenMC, для токамака ИТЭР по данным из работы [4] (DT-сценарий в режиме 400 МВт), а также для токамака TRT [5]. В работе приведен сравнительный анализ результатов расчетов в MCNP и OpenMC.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № Н.4к.241.09.23.1060 от 17.04.2023 на выполнение научно-исследовательской и опытно-конструкторской работы "НИОКР в обоснование программы исследований и технических требований к системам токамака с реакторными технологиями. Этап 2023-2024 годов".

Литература

1. *Romano P.* [et al.]. OpenMC: A State-of-the-Art Monte Carlo Code for Research and Development // Ann. Nucl. Energy. 2015. V. 82. P. 90–97.
2. *Mckinney G.* MCNP — A general Monte Carlo code n-particle transport code, Version 5 // Los Alamos National Laboratory Report. 2003. URL: https://mcnp.lanl.gov/pdf_files/TechReport_2003_LANL_LA-UR-03-1987Revised212008_SweezyBoothEtAl.pdf (дата обращения: 06.05.2024).
3. *Aymar R., Barabaschi P., Shimomura Y.* The ITER design // Plasma Phys. Control. Fusion. 2002. V. 44. P. 519–565.
4. *Bosch H., Hale G.* Improved formulas for fusion cross-sections and thermal reactivities // Nuclear Fusion. 2002. V. 32(4): 611.
5. *Portnov D.* [et al.]. Tokamak with Reactor Technologies (TRT): Preliminary Analysis of Nuclear Energy Release in Toroidal Field Coils // Plasma Physics Reports. 2021. V. 47. P. 1285–1290.

УДК 004.942

Численное моделирование переходных процессов в приповерхностном слое плазмы в экспериментах по имитации условий ЭЛМ и срывов ИТЭР

Е. З. Бирюлин, И. А. Алябьев, И. М. Позняк, В. Ю. Цыбенко, З. И. Новоселова, Е. Д. Федулаев

АО «ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Во время работы ИТЭР ожидается интенсивное плазменно-тепловое воздействие на защитные покрытия вакуумной камеры реактора. При переходных плазменных процессах (таких как ELMы и срывы) тепловой поток на стенку токамака может существенно превышать порог плавления и испарения материалов облицовочных покрытий, что повлечет их интенсивную эрозию.

Так как на существующих токамаках данные нагрузки недостижимы, эксперименты по исследованию эрозии проводятся на электронных и ионных пучках, мощных лазерных установках, а также — плазменных ускорителях [1, 2]. Однако в силу уникальности проекта ИТЭР ни одна установка не воспроизводит всех условий, ожидаемых во время переходных плазменных процессов в ИТЭР. Например, в экспериментах, проводимых на плазменных ускорителях, плотность примишенной плазмы выше, чем ожидаемая в ИТЭР, а температура — ниже (см. [3]). Налетающий на мишень поток плазмы является сверхзвуковым, поэтому вблизи поверхности мишени образуется ударная волна, экранирующая до 90% падающей энергии (см. [3]).

Для корректной экстраполяции лабораторных экспериментов на условия ИТЭР необходимо развитие теоретических и численных моделей, описывающих взаимодействие плазма-стенка и механизмы эрозии ОПЭ в широком диапазоне параметров падающего потока плазмы. На численную модель также

необходимо наложить следующие требования. Во-первых, численная модель должна учитывать возможное образование ударных волн вблизи поверхности облучаемой мишени. Во-вторых, модель должна учитывать движение расплава и появление рельефа поверхности мишени, а также взаимодействие потока плазмы с образующимся рельефом (т. н. «плазменный ветер», см. [4]).

В данной работе описывается начальная стадия разработки расчетной модели, описывающей обтекания мишени плазменным потоком ускорителя. Моделирование движения плазмы и расплава производится методом фазового поля. Движение фаз описывается системой уравнений, состоящей из уравнения Навье-Стокса и уравнения теплопроводности. Начальное распределение скорости в плазменном потоке считается известным, параметры потока выбраны исходя, из параметров потока плазмы КСПУ-Т.

Получена картина обтекания, процесс образования ударной волны, определено распределение давления по поверхности мишени. В дальнейшем планируется выполнить расчеты в широком диапазоне начальных условий и для верификации численной модели провести эксперименты на плазменном ускорителе КСПУ-Т в ГНЦ РФ ТРИНИТИ. Определена экспериментальная программа испытаний, включающая в себя исследования приповерхностного слоя плазмы с помощью калориметрии, датчиков давления и интерферометрии.

Литература

1. *Позняк И. М.* [et al.]. Эрозия металлов при воздействии интенсивных потоков плазмы // ВАНТ Сер. Термоядерный синтез. 2012. Т. 35. № 4. С. 23-33.
2. *Климов Н. С.* [et al.]. Разбрызгивание вольфрама при воздействии интенсивного потока плазмы // ВАНТ Сер. Термоядерный синтез. 2009. Т. 32. № 2. С. 52–61.
3. *Underwood C.* [et al.]. Efects of Flow Collisionality on ELM Replication in Plasma Guns // Fusion Engineering and Design. 2019. Т. 144. С. 97–106.
4. *Мартыненко Ю. В.* Эрозия поверхности металлов при воздействии плазменных потоков характерных для быстрых процессов в токамаках // Физика плазмы. 2020. Т. 46. № 1. С. 84–89.

УДК 533.924, 661.665.3, 621.039.66

Поведение защитного покрытия карбида бора при воздействии плазменного потока на установке КСПУ-Т

***И. А. Алябьев*[1,2], *И. М. Позняк*[1,2], *В. Л. Подковыров*[1], *В. А. Барсук*[1], *Е. З. Бирюлин*[1,2], *В. Ю. Цыбенко*[1,2], *З. И. Новоселова*[1,2], *Е. Д. Федулаев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

Графиты различных типов и углеродосодержащие покрытия широко использовались в качестве защитных материалов первой стенки и дивертора термоядерного реактора в конце прошлого века. Такой подход позволил улучшить параметры плазмы; тройное произведение удваивалось каждые два года. Однако достижение все большей плотности и температуры плазмы на современных токамаках, выявило ряд проблем в применении графитовых материалов. Основными отрицательными качествами углеродных покрытий являются высокий коэффициент распыления и эффективный захват изотопов водорода. Рециклинг водорода и накопление радиоактивного трития в стенке реактора являются препятствием для дальнейшего использования углеграфитовых материалов в термоядерных установках.

В настоящее время в качестве материалов защитных элементов, обращенных к плазме, в токамаках используются в основном вольфрам и бериллий. В международном экспериментальном термоядерном реакторе ITER, согласно проекту, первая стенка будет выполнена из бериллия, дивертор из вольфрама. В последнее время обсуждается замена всех защитных элементов вакуумной камеры на вольфрамовые. В действующих токамаках KSTAR, EAST, JET и других используется ITER-like вольфрамовый дивертор. На текущем этапе развития термоядерной техники, применение более термостойких чем графит металлических покрытий позволило существенно улучшить параметры плазмы.

Эксперименты, имитирующие взаимодействие высокоэнергитичной плазмы с макетами металлических защитных элементов, ставят под сомнение применимость вольфрамовых контактирующих с плазмой материалов для будущих термоядерных ректоров. Эрозия поверхности вольфрама приводит к попаданию тяжелых примесей в плазму, что приводит к ее быстрому остыванию из-за тормозного излучения. Образование оксидного слоя на металлической поверхности приводит к понижению температуры

плавления поверхностного слоя при интенсивном плазменном облучении. Удаление металлической пыли и восстановление in situ распыленных частей тайлов защитных элементов практически невозможно. Перепыленные слои W и Be эффективно захватывают и удерживают изотопы водорода до температур ~ 1400 К. Поэтому в данный момент идет поиск и испытание альтернативных защитных материалов для токамаков и плазменных установок.

Среди перспективных материалов выделяются термостойкие керамические покрытия. В данной работе проанализированы результаты исследований, посвященных созданию защитных слоев из карбида бора и изучению их поведения при экспериментальном моделировании плазменного воздействия [1,2]. Приведен обзор статей по получению аморфных и кристаллических покрытий B_4C из диборана B_2H_6 и карборана $C_2B_{10}H_{12}$ в тлеющем и рабочем разряде на плазменных установках PISCES-B, PLADIS, токамаках DIII-D, Т-10М, TEXTOR и стеллараторе Л-2М [3]. Описаны последствия плазменного воздействия на карбид бора в установках CODEMATT, КСПУ-Т, токамаках Т-10М, Т-3М и других [4]. Показано, что непосредственное воздействие плазмы на металлические облицовочные материалы плазменной камеры возможно предотвратить при использовании in situ возобновляемых защитных покрытий [1,2].

В работе представлены результаты исследования эрозии покрытий карбида бора, нанесенного на поверхность вольфрама, при воздействии плазменного потока КСПУ-Т. Плотность мощности на образцы w_e = 0,3–1,4 ГВт/м^2 при длительности воздействия τ = 1 мс, что соответствует ELM-событиям и ослабленным срывам в ИТЭР. Защитные слои B_4C толщиной 50 мкм были получены методами детонационного и атмосферного плазменного напыления. Кристаллическая структура образцов изучалась с помощью рентгенофазового анализа. Покрытие, полученное методом атмосферного плазменного напыления, было практически аморфным. Карбид бора, нанесенный на вольфрам путем детонационного напыления, имел выраженную кристаллическую структуру. При воздействии мощного плазменного потока B4C плавится, а при остывании из расплава формируются кристаллы.

С помощью численных расчетов показано, что поверхность карбида бора нагревается до температуры плавления T_m = 2743 К при плотности мощности плазменного воздействия w_e = 0,7 ГВт/м^2. Сублимация при температуре T_V = 3773 К достигается при $w_e \geq 1{,}5$ ГВт/м^2, температура на границе B_4C/W при этом не превышает 1500 К. Дальнейший рост температуры с повышением тепловой нагрузки оказывается существенно замедлен из-за интенсивного испарения.

В ходе плазменных испытаний наблюдается хрупкое разрушение карбида бора за счет растрескивания, что сопровождается выкрашиванием макроскопических кусочков покрытия. Для образца, полученного методом детонационного напыления, наблюдается блистеринг. Последующее плазменное воздействие приводит к разрушению пузырьков и образованию на их месте кратеров эрозии. Поэтому даже при более низкой тепловой нагрузке (1,1 ГВт/м^2 вместо 1,4 ГВт/м^2) слой B_4C, полученный детонационным напылением, эродирует сильнее, чем слой B_4C, полученный с помощью плазмотрона. Поверхность W не имеет следов эрозии, несмотря на частичное разрушение защитного покрытия B_4C. Карбид бора эффективно защищает вольфрам от перегрева.

На данный момент сложно говорить об однозначных преимуществах того или иного метода нанесения карбида бора на вольфрамовую поверхность. Покрытия карбида бора удовлетворяют многим требованиям, предъявляемым к контактирующим с плазмой материалам термоядерных установок. Тем не менее говорить об выборе нового защитного материала первой стенки термоядерного реактора преждевременно, требуется продолжение систематических исследований. Одним из направлений дальнейшей работы может стать облучение и последующее in situ восстановление покрытий карбида бора после частичного разрушения. Также требуется дальнейшее развитие технологии боронизации в плазме рабочего разряда в токамаках и плазменных установках.

Литература

1. *Buzhinskij O. I.* [et al.]. Behavior of the crystalline boroncarbide coating under tokamak conditions // NATO SPS Series B: Physics and Biophysics. 2011. P. 227–235.
2. *Беграмбеков Л. Б.* [и др.] Свойства карбида бора и его использование в качестве защитных покрытий на первой стенке токамака. // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2006. V. 29(4). P. 14–20.
3. *Buzhinskij O. I.* [et al.]. Review of in situ boronization in contemporary tokamaks // Fusion Technology. 1997. V. 32. P. 1–13.
4. *Buzhinskij O. I.* [et al.]. B4C Protective Coating under Irradiation by QSPA-T Intensive Plasma Fluxes // Physics of Atomic Nuclei. 2016. V. 79(7). P. 1187–1192.

УДК 533.9.082.5

Создание концепции измерения Z_{eff} для токамака ТРТ

***И. А. Макаренко*[1,2], *Н. В. Кузьмин*[2], *С. Н. Тугаринов*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Частное учреждение «Проектный центр ИТЭР»

Системы диагностики термоядерной плазмы играют важнейшую роль в управлении работой реактора и сборе экспериментальных данных для исследования процессов, протекающих в термоядерной плазме. Одним из важных параметров работы токамака является эффективный заряд плазмы Z_{eff}. Он используется в теоретических расчетах, описывающих процессы в плазме. По определению Z_{eff} — это средний заряд ионов в плазме [1]:

$$Z_{eff} = \frac{\sum_i n_i Z_i^2}{\sum_i n_i Z_i} = \frac{\sum_i n_i Z_i^2}{n_e}, \quad (1)$$

где n_i, Z_i — концентрация и заряд примеси, n_e — концентрация электронов.

Величина Z_{eff} характеризует степень чистоты изучаемой плазмы. Интегральное значение Z_{eff} дает понимание о состоянии вакуумной камеры при подготовке и в процессе работы установки. Изменение величины $Z_{eff}(r,\ t)$ характеризует пространственную динамику процессов переноса и накопления примесей в плазме.

Одним из методов определения Z_{eff} является измерение абсолютной интенсивности континуума — непрерывного по спектру излучения плазмы в области, свободной от линейчатого излучения примесей. В видимом диапазоне длин волн основной вклад в континуум вносит тормозное излучение. Излучение континуума определяется по формуле [2]:

$$I_{cont} = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^3 \frac{16}{3hc^3 m_e^2}\sqrt{\frac{\pi m_e}{6e}} \cdot \frac{g_{ff} \cdot n_e^2 \cdot Z_{eff} \cdot L}{\lambda \cdot \sqrt{T_e}} \left[\frac{\text{фотонов}}{\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{ср} \cdot \dot{A}}\right], \quad (2)$$

где n_e — концентрация электронов, T_e — температура электронов, g_{ff} — фактор Гаунта тормозного излучения (индекс *ff* обозначает свободно-свободные переходы для тормозного излучения), L — длина хорды наблюдения, λ — средняя длина волны в диапазоне наблюдения, ε_0 — электрическая постоянная, e — заряд электрона, m_e — масса электрона, h — постоянная Планка, c — скорость света.

Для проведения измерения излучения континуума необходимо определить диапазон длин волн свободный от линейчатого излучения атомов примесей, присутствующих в плазме. Для этого предполагается использовать светосильный спектрометр-полихроматор высокого разрешения [3], разработанный для диагностики АС и обеспечивающий измерение оптических спектров излучения плазмы одновременно в трех спектральных диапазонах: 468 ± 5 нм, 529 ± 5 нм и 656 ± 6 нм.

В рамках работы представлена схема будущих измерений. Произведена оценка I_{cont} с использованием расчетных параметров установки ТРТ. Также произведен расчет количества фотонов, регистрируемого оптической системой, а также соотношение сигнал/шум. Оценка показала, что система работоспособна для расчетных параметров ТРТ с необходимым временным разрешением.

В токамаке ТРТ также будет использоваться корпускулярно-спектроскопическая диагностика, называемая активной спектроскопией (АС, CXRS — Charge eXchange Recombination Spectroscopy) [3]. Данная диагностическая система может дополнять измерения величины $Z_{eff}(r,\ t)$, поскольку дает возможность измерить концентрацию основных примесей, имеющихся в плазме токамака.

Литература

1. *Hofmann J. V.* Visible spectroscopy on ASDEX: Preprint. Garching bei Munchen, 1991.
2. *Серов С. В.* Активная спектроскопическая диагностика термоядерной плазмы: анализ эффективности для ИТЭР и исследование ионной компоненты плазмы токамака Т-10: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. — М., 2020.
3. *Кузьмин Н. В.* [и др.]. Светосильный спектрометр-полихроматор высокого разрешения, оснащенный научными КМОП-камерами, для спектроскопической диагностики плазмы токамаков // Приборы и техника эксперимента. 2023. № 6. С. 85–97. DOI: 10.31857/s0032816223060046.

УДК 533.922

Методика расчета отношения сигнал-фон для диагностики вертикальная нейтронная камера ИТЭР

***П. А. Ревякин*[1,2], *Г. Е. Немцев*[1,2], *Р. Н. Родионов*[1]**

[1]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Вертикальная нейтронная камера (ВНК) — диагностическая система ИТЭР на основе многоканальных нейтронных коллиматоров, предназначенная для измерения пространственного распределения интенсивности нейтронного излучения плазмы в полоидальном сечении, нейтронного потока, плотности мощности реакций синтеза и профиля источника α-частиц [1]. Система состоит из 11 коллиматоров, на конце каждого из которых расположен блок детектирования быстрых нейтронов (БДБН) с четырьмя детекторами в своем составе: двумя ионизационными камерами деления (ИКД) с радиатором из ^{238}U и двух полупроводниковых алмазных детекторов различных чувствительностей.

Серьезной проблемой для плазменной томографии с помощью ВНК является высокая плотность потока фоновых нейтронов в местах расположения детекторов. Ряд улучшений конструкции детекторов и коллиматоров [2] позволил сильно снизить долю фоновых нейтронов, но их вклад все еще остается существенным. Для корректности симуляции нейтронного транспорта расчеты проводились в модели, максимально точно отображающей геометрию и изотопный состав окружающих материалов в 40-градусной модели ИТЭР C-Model [3].

Фоновые нейтроны можно разделить на две группы: непрямые нейтроны — попавшие в детекторы не через коллиматоры (либо пролетев через конструкцию ВНК без столкновений, либо рассеявшись на материалах реактора-токамака) — и backscatterednейтроны — рассеявшиеся на элементах первой стенки и дивертора напротив коллиматоров и попавшие в детекторы через коллиматоры. На основе результатов расчетов были вычислены отношения сигнал-фон для детекторов ВНК, а также рассчитан нагрев и активация конструкционных материалов ВНК.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № Н.4а.241.19.23.1014 от 18 января 2023 года на выполнение научно-исследовательской и опытно-конструкторской работы «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2023 году».

Литература

1. *Bertalot L.* [et al.]. Concept Design and Integration Aspects of ITER Vertical Neutron Camera // Proceedings of Science. 2016. PoS(ECPD2015)090. DOI: 10.22323/1.240.0090.
2. *Rodionov R.* [et al.]. Optimization of the ITER vertical neutron camera detectors and collimators // Fusion Eng. Des. 2021. V. 166: 112341.
3. *Leichtle D.* [et al.]. The ITER tokamak neutronics reference model C-Model // Fusion Eng. Des. 2018. V. 136A. P. 742–746.

УДК 533.922

Анализ отклика детектора на основе органического сцинтиллятора из состава нейтронного спектрометра ИТЭР

***Т. И. Семенов*[1,2], *Т. М. Кормилицын*[1,2], *П. А. Ревякин*[1,2], *А. В. Панкратенко*[1,2], *Ю. А. Кащук*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Частное учреждение «ИТЭР-Центр»

В текущей работе представлены результаты по моделированию отклика нейтронного спектрометра на основе органического кристалла стильбена ($C_6H_5CH = CHC_6H_5$). Основной задачей нейтронного спектрометра ИТЭР является восстановление ионной температуры на основе результатов анализа отклика детектора для широкого ряда сценариев разряда токамака ИТЭР (дейтериевые и дейтерий-тритиевые разряды).

Выполнено моделирование и верификация в эксперименте функции отклика нейтронного спектрометра, апробирован алгоритм восстановления исходного спектра нейтронного потока, и на основе модельных откликов проведены синтетические измерения ионной температуры плазмы.

В ходе решения задачи можно выделить несколько этапов.

1. Расчет группового нейтронного потока с заданной ионной температурой, при помощи методов Монте-Карло, в рамках нейтронного анализа экваториального порта № 11, подробнее в работе [1].

2. Моделирование отклика детектора при помощи кода GEANT4 [2] на основе полученного ранее группового нейтронного потока. Основные характеристики детекторного узла взяты из работы [3]

3. Восстановление исходного группового распределения по полученному отклику, для детектора с заданным энергетическим разрешением

4. Нахождение измеренного значения ионной температуры и анализ расхождений восстановленного значения относительно исходной величины ионной температуры плазмы.

Особенности градуировки шкалы детектора, учет нелинейности световыхода и сложной формы отклика потребовал проверки расчетных данных в эксперименте. Используя результаты измерений кристаллом стильбена, размещенным под несколькими углами к оси нейтронных генераторов НГ-24 (D-T, <En> ~ 14.7 МэВ, Yn = 1011 н/с) и НГ-14 (D-D, <En> ~ 2.75 МэВ, Yn = 2×108 н/с) — амплитудные спектры стильбенового детектора, проведена проверка разработанной модели.

Дополнительная проверка разработанной модели проведена с помощью результатов измерений на циклотроне ФТИ им. А.Ф. Иоффе с бериллиевой мишенью. Метод гамма-совпадений [4] был использован для записи отклика нейтронного спектрометра на моноэнергетический пучок быстрых нейтронов. Отклик детектора для нескольких энергий нейтронов позволил скорректировать разработанную модель детектора и эффективно увеличить достоверность показаний модели детектора.

Результаты экспериментов с нейтронными генераторами и измерения на циклотроне позволяют говорить о корректности проведенного анализа и разработанной модели в диапазоне энергий быстрых нейтронов от 2.45 до 15 МэВ. Дальнейшие этапы работы включают в себя детальный анализ наблюдаемого детектором спектра нейтронов с учетом фракции надтепловых ионов плазмы, анализ работы детектора в смешанных полях D-D и D-T нейтронов, расширение перечня исследуемых сценариев работы токамака.

Работа выполнена в рамках исполнения государственного контракта НИОКР «Разработка, опытное изготовление, испытание и подготовка к поставке специального оборудования в обеспечение выполнения российских обязательств по проекту ИТЭР в 2023 году» по Государственному контракту № Н.4а.241.19.23.1014 от «18» января 2023 г.

Литература

1. *Afanasenko R.* [et al.]. Radiation environment in ITER tokamak equatorial port 11 // Fusion Engineering and Design. 2024. V. 200: 114208.
2. *Agostinelli S.* [et al.]. GEANT4—a simulation toolkit // Nuclear instruments and methods in physics research section A // Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. V. 506(3). P. 250-303.
3. *Кащук Ю. А.* Сцинтилляционные спектрометры нейтронного и гамма-излучения для диагностики термоядерной плазмы: дис. … канд. физ.-мат. наук. Троицк, 2007.
4. *Ильясова М. В.* [и др.]. Измерения спектров гамма-и нейтронного излучения в ядерных реакциях с ионами ^{3}He и ^{9}Be // Письма в ЖТФ. 2021. Т. 47. № 3. С. 3–6.

Секция фотоники и двумерных материалов

Председатель: Д. Г. Баранов (к. ф.-м. н.), С. М. Новиков (к. ф.-м. н.)

Зам. председателя: А. Д. Большаков (к. ф.-м. н.)

Секретарь: А. С. Славич, И. А. Завидовский

Дата: 02.04.2024 и 03.04.2024 Время: 10:00

УДК 533.3

Оптическое отражение резонансной брэгговской структурой из 30 сдвоенных квантовых ям InGaN/GaN

А. А. Иванов, В. В. Чалдышев

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе

Периодическая модуляция диэлектрической проницаемости среды, приводящая к брэгговской дифракции, может быть достигнута как изменением показателя преломления в периодической структуре (брэгговский отражатель), так и за счет экситонов в квантовых ямах (КЯ) (резонансная брэгговская структура (РБС)). В РБС из N КЯ электромагнитное связывание экситонов приводит к формированию одной сверхизлучательной моды, сила осциллятора которой превышает в N раз силу осциллятора для экситона в одиночной КЯ, а излучательное время жизни в N раз короче [1]. Данный эффект может быть реализован даже при комнатной температуре, если использовать материалы III-N, в которых экситоны Ванье–Мотта имеют большие энергии связи и большие силы осциллятора в сравнении с традиционными материалами $A_{III}B_V$ [2]. Так как экситоны в КЯ чувствительны к внешнему воздействию, например электрическому полю, то РБС могут быть использованы как управляемые брэгговские отражатели. РБС на основе III-N обладают наилучшими параметрами для практического применения в сравнении с исследованными РБС на основе других систем материалов.

В работе [3] мы исследовали влияние беспорядка на оптическое отражение от почти периодической системы квазидвумерных экситонов в КЯ InGaN, организованных по типу РБС. Было обнаружено, что существует критическое отклонение от точной периодичности, когда отражение от одиночной сверхизлучающей экситон-поляритонной моды трансформируется в многомодовый спектр. Этот критический беспорядок оказывается обратно пропорциональным числу периодов резонансной брэгговской структуры. Таким образом, эффект формирования сверхизлучательной моды может быть уничтожен совсем небольшим беспорядком, которого в реальной жизни не избежать. В теоретической работе [4] была разработана концепция РБС, в элементарной ячейке которой используется две близкорасположенные КЯ. Это приводит к перекрытию волновых функций носителей, что эффективно обеспечивает увеличение радиационного затухания в ~ 2 раза. Такой подход позволяет усилить взаимодействие света с экситонами в РБС с меньшим числом периодов, что было экспериментально подтверждено в работе [5].

В данной работе мы сообщаем о результатах экспериментального и теоретического анализа РБС из 30 сдвоенных КЯ InGaN/GaN. Образец был выращен методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений на подложке сапфира (0001). Измерения спектров оптического отражения проводились для различных углов падения и поляризаций света при комнатной температуре. Численные расчеты оптических спектров выполнялись с использованием метода матриц переноса.

На рис. 1 представлены экспериментальные и расчетные спектры отражения при комнатной температуре от РБС из 30 сдвоенных КЯ InGaN/GaN для S-поляризованного света, падающего под углами 15° (а) и 60° (б). Поскольку падающий свет исходит из окружающего воздуха, а антиотражающее покрытие не использовалось, в спектрах отражения наблюдается фоновое отражение, зависящее от угла падения света согласно хорошо известным формулам Френеля. Во всех представленных спектрах наблюдаются осцилляции Фабри–Перо, затухающие при приближении к краю фундаментального поглощения GaN. Осцилляции Фабри–Перо формируются в результате интерференции света, отраженного от границ

всей эпитаксиальной системы, включающей в себя РБС и буферный слой GaN ~ 3 мкм. Край фундаментального поглощения GaN проявляется небольшой особенностью в спектрах отражения в области ~ 363 нм. Так как длина волны брэгговского резонанса зависит от угла падения света, в то время как положение экситонного резонанса остается неизменным (если не учитывать слабый эффект пространственной дисперсии), появляется возможность исследования перестройки двойного экситонно-брэгговского резонанса.

На рис. 1*а* на длине волны ~ 410 нм наблюдается особенность, являющаяся результатом интерференции брэгговского резонанса и осцилляций Фабри–Перо. Данный рисунок демонстрирует ситуацию, когда брэгговский и экситонный резонансы спектрально разделены друг относительно друга (спектральное положение экситонного резонанса показано на рисунке вертикальной оранжевой пунктирной линией). При увеличении угла падения света положение брэгговского пика смещается в коротковолновую часть спектра. На рис. 1*б* показана экспериментальные и расчетные спектры отражения, когда брэгговский резонанс смещается в область экситонного резонанса. В этом случае наблюдается значительное возрастание амплитуды и полуширины резонансной полосы отражения. Сравнение спектров с учетом (красная линия) и без учета экситонного вклада (синяя штриховая линия) позволяет сделать вывод о существенности экситонного вклада в амплитуду и ширину резонансной полосы отражения при комнатной температуре. Совокупность экспериментальных и модельных результатов, полученных для различных углов падения, убедительно свидетельствует о том, что в образце формируется сверхизлучающая экситон-поляритонная мода.

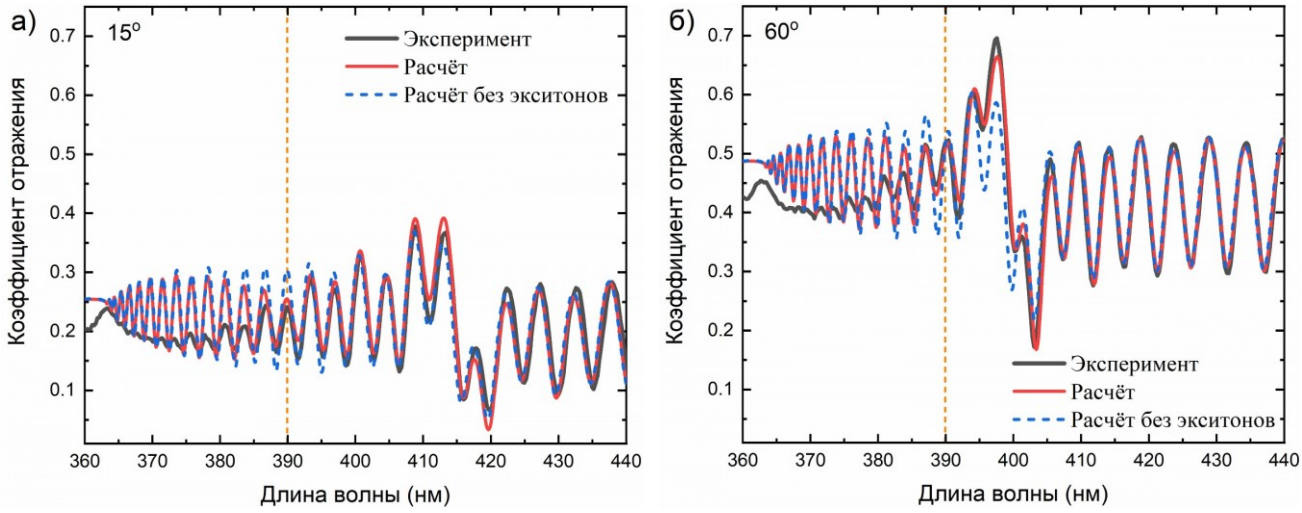


Рис. 1. Экспериментальные и расчетные спектры отражения S-поляризованного света, падающего под углами 15° (*а*) и 60° (*б*), от РБС из 30 сдвоенных КЯ InGaN/GaN при комнатной температуре. Черная линия — эксперимент, красная линия — расчет с учетом экситонов в КЯ, синяя штриховая линия — расчет без экситонов в КЯ. Спектральное положение экситонного резонанса — оранжевая штриховая линия

Из сравнения экспериментальных и расчетных спектров можно сделать вывод, что описанная выше модель позволяет довольно точно описать резонансный оптический отклик РБС из 30 сдвоенных КЯ InGaN/GaN. Сравнение спектров с учетом и без экситонного вклада позволяет сделать вывод, что существует как модуляция отражения, вызванная контрастом показателя преломления в InGaN/GaN РБС, так и периодической решеткой экситонов. Из численных расчетов были получены следующие экситонные параметры: параметр радиационного и нерадиационного затухания в КЯ InGaN 0.25±0.02 мэВ и 40±5 мэВ, соответственно. Данные результаты хорошо согласуются с параметрами, полученными для РБС с одиночными КЯ InGaN/GaN [6,7].

Таким образом, разработка РБС со сложной сверхячейкой, которая может обеспечить более сильную связь света и материи с меньшим числом периодов РБС, представляется более привлекательным путем усовершенствования по сравнению с увеличением числа периодов.

Литература

1. *Ивченко Е. Л., Несвижский А. И., Йорда С.* Брэгговское отражение света от структур с квантовыми ямами // ФТТ. 1994. Т. 36. № 7. С. 2118–2129.
2. *Chaldyshev V. V.* [et al.] Optical lattices of InGaN quantum well excitons // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99(25): 251103.
3. *Ivanov A. A.* [et al.] Critical spatial disorder in InGaN resonant Bragg structures // Appl. Phys. Lett. 2022. V. 121(4): 041101.

4. *Ivchenko E. L.* [et al.] Multiple-quantum-well-based photonic crystals with simple and compound elementary supercells // Phys. Rev. B. 2004. V. 70(19): 195106.
5. *Большаков А. С.* [и др.]. Резонансная брэгговская структура со сдвоенными квантовыми ямами InGaN // ФТТ. 2013. Т. 55. № 9. С. 1706–1708.
6. *Bolshakov A. S.* [et al.] Room temperature exciton-polariton resonant reflection and suppressed absorption in periodic systems of InGaN quantum wells // J. Appl. Phys. 2017. V. 121(17): 133101.
7. *Иванов А. А.* [и др.]. Резонансное отражение света оптической решеткой экситонов, сформированной 100 квантовыми ямами InGaN // ФТП. 2021. Т. 55. № 9. С. 733–737.

УДК 535.544

Оптические свойства двуосных ван-дер-ваальсовых кристаллов и их применения

А. С. Славич, М. К. Татмышевский, А. Н. Токсумаков, О. Г. Матвеева, Д. В. Грудинин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Высокий показатель преломления и оптическая анизотропия являются ключевыми параметрами для устройств современной нанофотоники [1]. В последние годы ван-дер-ваальсовы кристаллы привлекают особое внимание из-за их высокого показателя преломления и слоистой структуры, которая неизбежно приводит к оптической анизотропии [2–3]. Однако анизотропные оптические свойства в плоскости ван-дер-ваальсовых слоев остаются мало изученными, тогда как для многих устройств анизотропия в плоскости является более предпочтительной [4].

В данном исследовании демонстрируется метод поиска и изучения материалов с высокой анизотропией. По результатам исследования определены оптические константы микрокристаллов сульфида мышьяка с помощью спектральной эллипсометрии в сочетании с поляризационной микроспектроскопией пропускания и спектроскопией комбинационного рассеяния. Экспериментально установлено, что материал обладает рекордными оптическими свойствами в видимом и ближнем ультрафиолетовом диапазонах. Таким образом, этот кристалл обладает дополнительной гибкостью в функциональности за счет одновременно сильной оптической анизотропии и высокого показателя преломления. Следовательно, представленные результаты открывают новые возможности для оптических устройств, работающих в видимом и ближнем ультрафиолетовом диапазонах, таких как сверхтонкие волновые пластины и гибкие фотодетекторы, чувствительные к поляризации. На основе полученных данных была продемонстрирована работа четвертьволновой пластины рекордно малой толщины.

Литература

1. *Jahani S.* [et al.]. All-dielectric metamaterials // Nat. Nanotechnol. 2016. V. 11. P. 23–36.
2. *Ermolaev G.* [et al.]. Giant optical anisotropy in transition metal dichalcogenides for next-generation photonics // Nat. Commun. 2021. V. 12: 854.
3. *Munkhbat B.* [et al.]. Nanostructured transition metal dichalcogenide multilayers for advanced nanophotonics // Laser Photonics Rev. 2022. V. 17(1): 2200057.
4. *Slavich A.* [et al.]. Exploring van der Waals materials with high anisotropy: geometrical and optical approaches // Light Sci. Appl. 2024. V. 13: 68.

УДК 538.958

Терагерцевая сегнетоэлектрическая мягкая мода в тонких пленках слабодопированного $SrTiO_3$

А. В. Мелентьев, Е. С. Жукова, Б. М. Некрасов, М. В. Таланов, Б. П. Горшунов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Титанат стронция широко применяется в современной электронике благодаря высокой диэлектрической проницаемости, которая достигает нескольких десятков тысяч при гелиевых температурах, и малой дисперсии в микроволновом диапазоне частот. Оба свойства тесно связаны с сегнетоэлектрической

мягкой модой, на которую можно влиять множеством способов (приложение электрического поля, химическое замещение и др.)

В работе были исследованы тонкие поликристаллические пленки (150 нм) титаната стронция SrTiO3, допированного переходными металлами (M = 2% Mn, Ni, Fe, Co), выращенные на сапфировых подложках. С помощью терагерцевой спектроскопии во временной области и инфракрасной Фурье-спектроскопии были получены спектры коэффициента пропускания и диэлектрической проницаемости пленок в диапазоне частот 7–1000 $см^{-1}$ и температур 5–300 К. Во всех образцах в диапазоне частот 60–110 $см^{-1}$ была обнаружена [1] сегнетоэлектрическая мягкая мода, температурное поведение параметров которой хорошо описывается феноменологической формулой Барретта. Соответствующие тонким пленкам температуры Кюри отрицательны и существенно отличаются от температуры Кюри монокристаллического SrTiO3. Это указывает на усиление дестабилизации сегнетоэлектрического состояния за счет квантовых флуктуаций, неоднородностей на границах кристаллитов, локального механического напряжения и беспорядка, вызванного допированием. В спектрах комбинационного рассеяния пленок при комнатной температуре были обнаружены две моды, запрещенные в чистом кристалле SrTiO3 — TO2 и LO4. Их появление связано с локальным нарушением симметрии кристалла. Пик TO2 имеет асимметричную форму, описываемую формулой Фано. Обнаружена корреляция между параметром асимметрии пика TO2 и температурой Кюри для пленок с различными допантами.

Работа была выполнена в рамках гранта РНФ 21-12-00358 (терагерцевые и ИК измерения, анализ данных) при поддержке министерства науки и высшего образования РФ FSMG-2021-0005 (измерения комбинационного рассеяния).

Литература

1. *Zhukova E. S.* [et al.]. Terahertz ferroelectric soft mode in weakly doped $SrTiO_3$: M thin films (M=Mn, Ni, Fe, Co) // J. Alloys Compd. 2024. V. 976: 173255.

УДК 533.922

Теоретическая модель типа Фридриха–Винтгена для квазисвязанных состояний в наночастицах типа ядро–оболочка

А. Эгбали*, *А. А. Вишневый

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

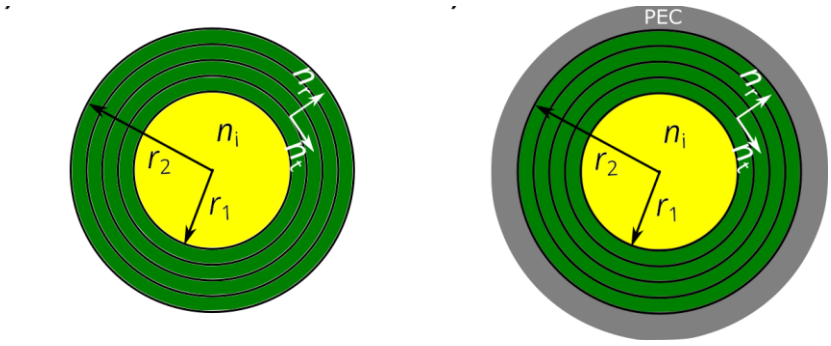
В данной работе представлена теория квазисвязанных состояний в континууме (квази-ССК) в наноструктурах ядро-оболочка с радиальной анизотропией. Изучаемая структура состоит из изотропного ядра с показателем преломления 4 и радиально-анизотропной оболочки с тангенциальным показателем преломления 4 и радиальным показателем преломления 1 (рис. 1*а*). Поскольку эта структура не нарушает сферической симметрии, собственные моды структуры являются чистыми Ми-состояниями, а электрическая дипольная мода может иметь добротность более чем в 30 раз выше, чем аналогичная мода у изотропных наносфер. Поскольку добротность моды сильно зависит от соотношения радиуса ядра и полного радиуса частицы, наиболее вероятным механизмом формирования квази-ССК является механизм типа Фридриха–Винтгена [1]. Однако имеются существенные отличия. Так, теория Фридриха–Винтгена обычно используется для описания собственных мод несферических систем, а квази-ССК при этом возникает вследствие деструктивной интерференции в некоторой сферической гармонике.

В данной работе в качестве возмущения рассматривается излучение в свободное пространство. Таким образом, невозмущенной системой предполагается та же частица, но окруженная идеальным проводником электрического тока (PEC). Данная система поддерживает две нормальные моды без затухания. При удалении слоя PEC данные моды могут излучать в свободное пространство, то есть, в терминах теории связанных мод, имеется связь между собственной модой и расходящейся дипольной сферической волной. Коэффициент связи определяется точным дипольным моментом моды, который зависит от распределения поля и частоты [2]. Предполагая, что собственное состояние возмущенной системы является линейной комбинацией исходных собственных мод, можно свести поиск собственных мод, к нелинейной задаче на собственные вектора и собственные значения в матрице 2x2, коэффициенты которой являются функциями частоты. Полученная в результате ее решения зависимость добротности собственных мод от

соотношения радиуса ядра и полного радиуса демонстрирует качественное согласие с результатами численного моделирования.

Разработка теории связанных мод для квази-ССК закладывает основы создания эффективных и компактных нанофотонных устройств на основе высокорефрактивных анизотропных материалов.

Работа поддержана грантом РНФ № 22-79-10312.



а *б*

Рис. 1. Схематическое изображение: *а* — наночастицы ядро-оболочка с изотропным ядром и радиально анизотропной оболочкой; б — наночастица ядро-оболочка с изотропным ядром и радиально-анизотропной оболочкой, окруженной идеальным электрическим проводником

Литература

1. *Amrani M.* [et al.]. Friedrich-Wintgen bound states in the continuum and induced resonances in a loop laterally coupled to a waveguide // Physical Review B. 2022. V. 12(106): 125414.
2. *Fernandez-Corbaton I.* [et al.]. Exact dipolar moments of a localized electric current distribution // Optics express. 2015. V. 26 (23): 33044-33064.

УДК 535.015, 537.632.3, 537.862

Магнитоиндуцированная модуляция эффекта Гуса–Хенхен в магнитофотонных кристаллах

А. А. Неровная, М. С. Гаврюшина, А. И. Мусорин, И. В. Соболева, А. Ю. Фролов, А. А. Федянин

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В настоящее время одним из основных направлений в современной нанофотонике является изучение оптических эффектов в наноструктурах, позволяющих управлять светом при помощи внешних воздействий. К ним относится и эффект Гуса–Хенхен (ГХ) [1], который представляет собой продольный сдвиг отраженного пучка относительно положения, определяемого геометрической оптикой.

Одним из способов усиления эффекта ГХ является возбуждение поверхностных плазмонов-поляритонов (ППП) [2], которые осуществляют дополнительный перенос энергии на границе раздела металла и диэлектрика. Плазмонные кристаллы с добавлением магнитных материалов позволяют модулировать волновой вектор ППП с помощью внешнего магнитного поля. Магнитное поле, приложенное к магнитоплазмонным кристаллам, приводит к возникновению недиагональных членов в их тензоре диэлектрической проницаемости. Поскольку ППП чувствительны к изменениям параметров сред, в которых они распространяются, то происходит модификация волнового вектора ППП:

$$k_{\mathrm{sp}}(H) = k_{sp}(0) + \Delta k(H), \qquad (1)$$

В статье [3] экспериментально показали, что возбуждение ППП при приложении магнитного поля в экваториальной геометрии, является причиной усиления экваториального магнитооптического эффекта Керра (ЭМОЭК), проявляющегося в модуляции интенсивности отраженного света. В области возбуждения поверхностных плазмонов наблюдалось увеличение ЭМОЭК примерно на один порядок величины по сравнению с эффектом в тонкой пленке никеля.

В последнее время появились работы, в которых пытались объединить магнитооптическую активность для возможности управления эффектом ГХ. В работе [4] впервые экспериментально продемонстри-

ровали магнитооптический эффект ГХ (МОГХ) вблизи ППП резонанса на призме ВК7 и последующих слоев железа и серебра. МОГХ представлял собой изменение величины эффекта ГХ при приложении экваториального магнитного поля. Максимальный рассчитанный сдвиг МОГХ составил 250 нм. Поскольку эффект МОГХ более чувствителен к показателю преломления образца, чем сдвиг ГХ, он может быть применен как способ определения показателя преломления.

В данной работе наблюдалась модуляция пространственного распределения интенсивности отраженного света при наличии эффекта ГХ в магнитофотонных кристаллах. Такое изменение интенсивности соответствует пространственно разрешенному экваториальному магнитооптическому эффекту Керра (ЭМОЭК(x)). Усиление эффекта ГХ происходило за счет возбуждения блоховских поверхностных волн (БПВ). БПВ имеют большую длину распространения по сравнению с ППП, потому что распространяются в менее поглощающей среде.

В качестве образца был выбран магнитофонный кристалл из 14 чередующихся слоев SiO_2 и Ta_2O_5 с толщиной 132 нм и 93 нм и показателем преломления 1,46 и 2,1 соответственно и волноводного магнитного слоя Bi:YIG толщиной 1060 нм. В ходе расчетов и эксперимента была получена угловая зависимость эффекта ГХ в МФК. БПВ была возбуждена лазерным излучением с длиной волны 675 нм вблизи резонансного угла падения 58,5º. Максимальный рассчитанный и экспериментальный сдвиг ГХ наблюдался вблизи резонансного угла падения и составил 33,2 мкм. Значение магнитоиндуцированной модуляции пространственной интенсивности отраженного пучка, которая является пространственно разрешенным ЭМОЭК(x), было рассчитано по формуле:

$$\text{ЭМОЭК(x)} = \frac{I(x,H)-I(x,0)}{I(x,0)} \times 100\%, \qquad (2)$$

Модуляция интенсивности была вызвана изменением резонансного угла падения при приложении магнитного поля. Это привело к модуляции пространственного распределения интенсивности отраженного пучка при наличии эффекта ГХ. На рис. 1 синей кривой показано, что максимальное значение ЭМОЭК(x) в эксперименте составило 7%.

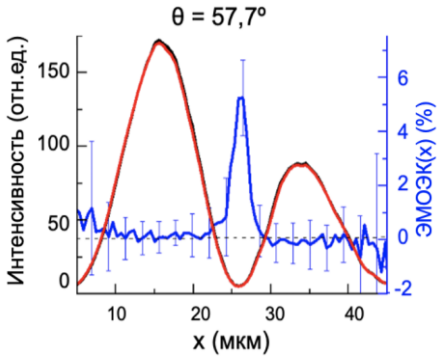


Рис. 1. Пространственное распределение интенсивности отраженных пучков в отсутствии (красная кривая) и наличии магнитного поля (черная кривая). Синей кривой показано пространственное распределение ЭМОЭК(x)

Таким образом, в ходе работы было показано, что усиление ЭМОЭК может происходить с помощью эффекта ГХ в магнитофотонных кристаллах при возбуждении БПВ.

Литература

1. *Goos F., Hänchen H.* A new and fundamental experiment on total reflection // Ann. Phys (Leipzig). 1947. V. 1(7–8). P. 333–346.
2. *Barnes W. L.* [et al.]. Surface plasmon subwavelength optics // Nature. 2003. V. 424(6950). P. 824–830.
3. *Grunin A. A.* [et al.]. Surface-plasmon-induced enhancement of magneto-optical Kerr effect in all-nickel subwavelength nanogratings // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97(26): 261908.
4. *Tang T.* [et al.]. Weak measurement of magneto-optical Goos-Hänchen effect // Opt. Express. 2019. V. 27(13). P. 17638–17647.

УДК 535.012.21

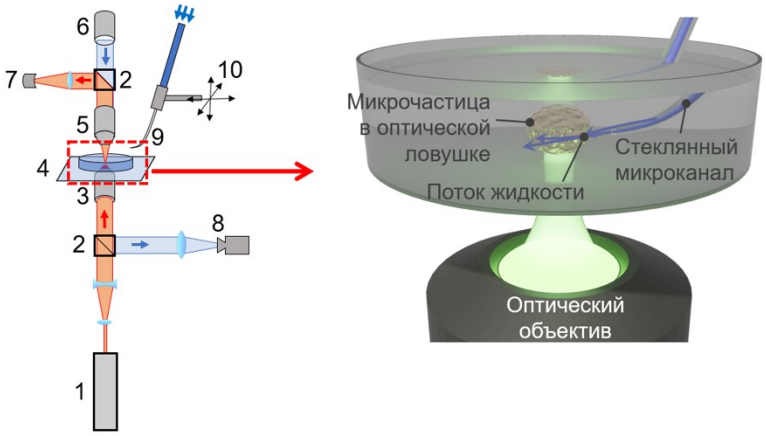
Кинетика движения и растворения частиц карбоната кальция в оптической ловушке

А. А. Ушков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Ватерит — полиморф карбоната кальция ($CaCO_3$), обладающий широким спектром потенциальных применений в биологии и медицине благодаря удачному сочетанию химических, морфологических и физических свойств [1, 2]. Как метастабильная фаза $CaCO_3$, ватерит испытывает фазовые превращения (например, превращение в кальцит) или растворение при стандартных лабораторных условиях, что является перспективным для использования этих частиц в качестве микрокапсул для целевой доставки лекарств. Кроме того, синтез ватерита — дешевый, простой и гибкий процесс, позволяющий оптимизировать форму и размер частиц в зависимости от используемых химических добавок [3]. Поскольку выделение лекарства из микрочастиц связано со структурными преобразованиями, необходимо изучить взаимодействие частиц с жидкостью. Кроме того, диффузия капсул также зависит от взаимодействия с вязкими микропотоками жидкости, и сочетание нескольких инструментов для микроманипуляций позволяет провести такие исследования.

В рамках работы рассматривается кинетика движения и растворения одиночных частиц ватерита в потоке жидкости, специально направленной на частицу из микросопла (размер отверстия ~1 мкм). Для стабилизации частицы в потоке она находится в оптической ловушке с длиной волны 980 нм, созданной с помощью высокоапертурного оптического объектива (NA=1.3) (рис. 1*а*). Особенностью экспериментальной установки является возможность независимого контроля положения частицы (с помощью оптического пинцета) и положения микросопла (с помощью 3D-микроманипулятора), что позволяет детально изучить взаимодействие частицы с микропотоком жидкости при разных значениях прицельного параметра.



а *б*

Рис. 1. Общая схема экспериментальной установки (*а*): *1* — лазерный диод 980 нм; *2* — расщепители пучков, *3* — 100х объектив; *4* — предметный столик и чашка Петри с частицей $CaCO_3$; *5* — 10х объектив,; *6* — лампа белого света; *7* —четырехквадрантный фотодетектор; 8 — видеокамера; 9 — микроканал, 10 — микроманипулятор. Детальное изображение взаимного расположения частицы в оптической ловушке микроканала в общем случае (*б*)

Положение частицы относительно центра оптической ловушки регистрировалось как по асимметрии рассеяния лазерного пучка на частице с помощью четырехквадрантного фотодетектора, так и с помощью прямого наблюдения в видеокамере. Управление положением микросопла во времени осуществлялось через специально написанный скрипт в Matlab, отправляющий ASCII-команды на микроконтроллер манипулятора через последовательный COM-порт.

Жесткость оптической ловушки κ была определена по характеру броуновского движения частицы. Среднеквадратичное отклонение D частицы от положения равновесия в ловушке:

$$D(\tau) = \overline{[x(t+\tau) - x(t)]^2} = 2\frac{k_b T}{\kappa}[1 - \exp(-\tau/\tau_0)], \quad (1)$$

где $x(t)$ — координата частицы по оси X в момент времени t, T — температура среды, $\gamma = 3\pi\eta a$ — коэффициент сопротивления среды из формулы Стокса, $\tau_0 = \gamma/\kappa$ — характерное время, за которое частица при броуновском движении достаточно отклоняется от положения равновесия, чтобы «почувствовать»

возвращающую оптическую силу ловушки. При размере частицы $a = 2.5$ мкм жесткость ловушки оказалась равна $\kappa = 10$ пН/мкм.

Чтобы предотвратить растворение ватерита, эксперимент проводился в спирте. Автоматическое прохождение микросоплом определенных позиций вокруг частицы и одновременная регистрация отклонения частицы от равновесия позволила восстановить поле скоростей вязких микропотоков жидкости, выходящих из микроканала (рис. 2*а*). Прямое наблюдение частицы в видеокамеру позволяет в режиме реального времени регистрировать растворение. Для этого ватерит, изначально находящийся в спиртовой среде, из микросопла начинает обдуваться потоком деионизованной воды. Соответствующие кривые растворения с и без потоков воды указаны на рис. 2*б*.

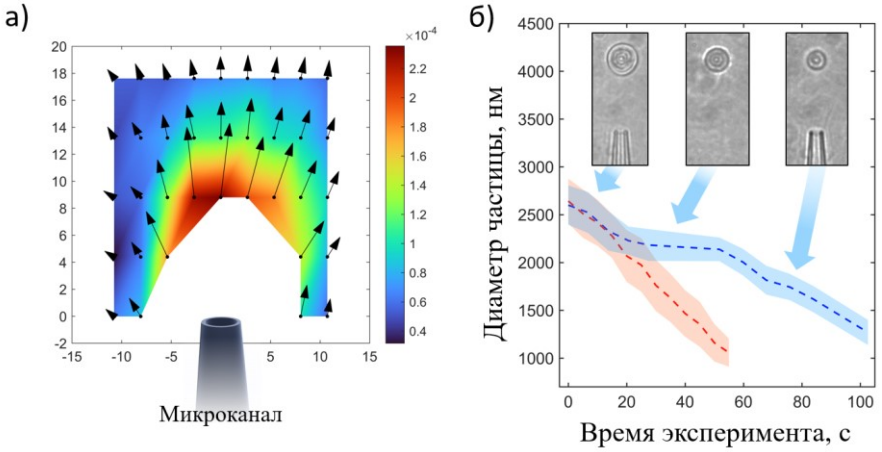


Рис. 2. Распределение потоков вязких микропотоков вблизи сопла микроканала, рассчитанный с использованием оптической ловушки (*а*). Кривые растворения частицы ватерита в спиртовой среде под постоянным потоком деионизованной воды из микроканала (красная кривая) и с кратковременным отсутствием потока воды (синяя кривая) (*б*)

Литература

1. *Trushina D. B.* [et al.]. $CaCO_3$ vaterite microparticles for biomedical and personal care applications // Materials Science and Engineering: C. 2014. V. 45. P. 644-658. DOI: 10.1016/j.msec.2014.04.050.
2. *Noskov R. E.* [et al.]. Golden vaterite as a mesoscopic metamaterial for biophotonic applications // Advanced Materials. 2021. V. 33(25): 2008484. DOI: 10.1002/adma.202008484.
3. *Bahrom H.* [et al.]. Controllable synthesis of calcium carbonate with different geometry: Comprehensive analysis of particle formation, cellular uptake, and biocompatibility // ACS Sustainable Chemistry & Engineering. 2019. V. 7(23). P. 19142–19156. DOI: 10.1021/acssuschemeng.9b05128.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Исследование диэлектрической функции платины

А. П. Целин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Платина (Pt) уже давно является предметом интереса в различных областях науки из-за своих исключительных химических и физических свойств. В последние годы значительный объем исследований сосредоточен на применении в медицине в качестве биосовместимого металла, в химии в качестве катализатора, а также в электронике из-за его высокой проводимости. и устойчивость к коррозии. Поэтому изучение свойств этого материала является важной задачей для ученых. Несмотря на длительную историю изучения оптических свойств платины, первые статьи датируются 1960 годов [1], в литературе представлено мало информации о оптических свойствах и плазменной частоте платины. Основная масса работ направлена на изучение отражения в глубоком УФ. Так же недавние статьи [2] показывают значительную расходимость имеющихся результатов. Одним из таких расхождений является значение плазменной частоты платины, которая является важной характеристикой материала. Помимо этого, был проведен анализ межзонных переходов для большего понимания причин различий предыдущих исследований. Так же есть теоретические расчеты этой характеристики, которые надо подтвердить или опровергнуть. Поэтому

в этой работе изучаются оптические свойства платины в широком диапазоне длин волн, и дальнейшее их сравнение с теоретическими расчетами.

В данной работе измеряется диэлектрическая функция платины с помощью эллипсометрии, определяется плазменная частота, удельное сопротивление пленок платины, изготовленных методом электронного осаждения из паровой фазы. С помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ) детально изучены особенности поверхности и однородность поверхности пленок платины. Чтобы получить плазменную частоту применяется модель Друде-Лоренца, которая хорошо описывает диэлектрическую функцию металлов в широком диапазоне длин волн. Так же сравнивается полученная плазменная частота с теоретическими расчетами [3]. Наши результаты показывают, что межзонные переходы существенно влияют на ближнюю инфракрасную область. Кроме того, платина имеет высокий показатель преломления в широком диапазоне длин волн, что будет полезно во многих приложениях.

Литература

1. *Yu A. Y. C., Spicer W. E., Hass G.* Optical properties of platinum // Phys. Rev. 1968. V. 171(3). P. 834–835.
2. *Glantschnig K., Ambrosch-Draxl C.* Relativistic effects on the linear optical properties of Au, Pt, Pb and W // New J. Phys. 2010. V. 12(10): 103048.
3. *Pogodaeva M. K., Levchenko S. V., Drachev V. P.* Spin-dependent plasma frequency from all-electron ab initio calculations including spin-orbit coupling // Phys. Rev. B. 2023. V. 107(4): 045113.

УДК: 537.9

Электросопротивление двухслойного графена, ограниченное электрон-дырочным рассеянием

А. В. Грибачев, Д. А. Свинцов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В данной работе рассматривается проблема минимальной проводимости графена с наведенной запрещенной зоной в условиях, когда основным механизмом является электрон-дырочное рассеяние. Показано [1] , что в случае чистого электрон-дырочного рассеяния нарушается закон Аррениуса. При малых значениях запрещенной зоны имеется аннигиляционный минимум, а при больших значениях сопротивление от величины запрещенной зоны зависит линейно. Получено выражение для концентрации примесей, при которой эффект становится наблюдаемым.

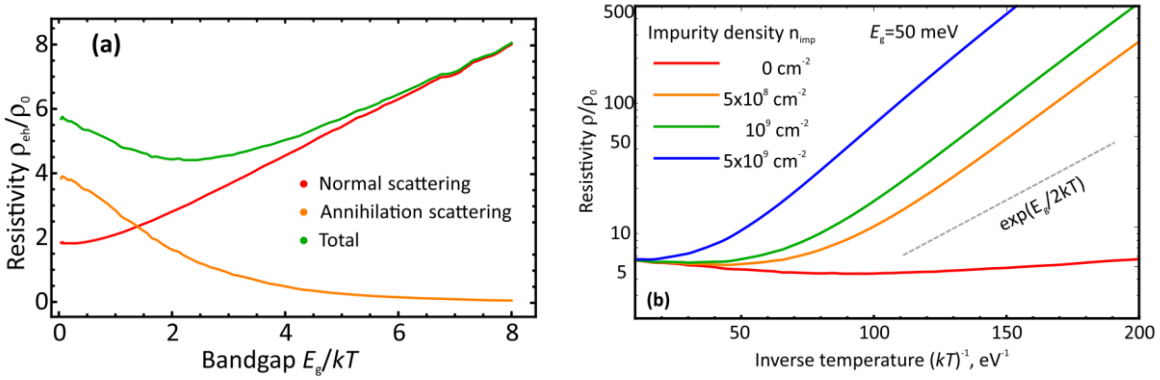


Рис. 1 Зависимость сопротивления от ширины запрещенной зоны с учетом нормального и аннигиляционного канала рассеяния (*а*). Зависимость сопротивления от температуры при фиксированной ширине запрещенной зоны при учете электрон-дырочного рассеяния и рассеяния на примесях (*б*). Пунктиром показан закон Аррениуса. На обоих графиках сопротивление измеряется в единицах кванта сопротивления.

Электронный транспорт в случае, когда доминирующий вклад в рассеяние обусловлен межчастичным рассеянием, приобретает все больший интерес научного сообщества, особенно в связи с развитием сверхчистых двумерных материалов.

В настоящее время [2] умеют получать графен, в котором концентрация остаточных примесей заметно ниже, нежели концентрация термически-активированных электронов и дырок. В этом случае,

межчастичное рассеяние доминирует над рассеянием на примесях, что ведет к интересным физическим эффектам и неразрешенным проблемам. Одной из таких проблем является проблема минимального сопротивления [1]. Хотя и имеется довольно много теоретических и экспериментальных исследований посвященых электрон-дырочному рассеянию в бесщелевом случае, довольно мало внимания уделено системам с щелью [3, 4].

В данной работе [1] производится аккуратный теоретический вывод времени рассеяния и электрического сопротивления в точке нейтральности для графена с щелью, описываемого двумерным гамильтонианом Дирака с массой. Вывод производится вариационным методом из кинетических уравнений с учетом межчастичного рассеяния и рассеяния на примесях, в предположении, что заряды взаимодействуют посредством неэкранированного кулоновского потенциала.

В работе исследуются зависимости сопротивления и частоты рассеяния относительно обратной температуры. Показано, что при большой запрещенной зоне сопротивление в точке нейтральности прямо пропорционально Eg/KT, что противоречит ожидаемому закону Аррениуса. В работе проводится строгий вывод того факта, что в случае доминирования eh-рассеяния закона Аррениуса не возникает, т.к. сами плотности носителей экспоненциально убывают по параметру Eg/kT и события рассеяния так же экспоненциально становятся редки.

Литература

1. *Gribachov A. V., Svintsov D. A., Vyurkov V.* Electron-hole collision limited resistance of gapped graphene // Phys. Rev. B. V. 109(8): 085424. DOI: 10.1103/PhysRevB.109.085424.
2. *Cao Y.* [et al.]. Quality Heterostructures from Two-Dimensional Crystals Unstable in Air by Their Assembly in Inert Atmosphere. — Nano Letters. 2015. V. 15. P. 4914–4921.
3. *Jung J.* [et al.]. Origin of band gaps in graphene on hexagonal boron nitride // Nature Communications. 2015. V. 6: 6308.
4. *McCann E., Abergel D. S. L., Fal'ko V. I.* The low energy electronic band structure of bilayer graphene // The European Physical Journal Special Topics. 2007. V. 148. P. 91–103.

УДК 535-45

Топологические фазовые сингулярности в отражении света от одноосных сред с поглощением

В. А. Маслова, Д. Г. Баранов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эффект нулевого отражения от диэлектрика p-поляризованной волны, падающей под углом Брюстера, является одним из простейших, но не тривиальных эффектов, возникающих в линейных системах. Известно, что поглощение в диэлектрике нарушает нулевое отражение света. Тем не менее, идеальное пропускание подающей p-поляризованной волны можно восстановить, добавив анизотропию к поглощающему материалу. Одноосный поглощающий кристалл с оптической осью, перпендикулярной границе раздела, может обеспечить идеальное пропускание, которое в конечном счете сопровождается идеальным поглощением прошедшей волны. Данный эффект был продемонстрирован на примере гексагонального нитрида бора в среднем инфракрасном диапазоне [1] и метаматериалах [2]. Однако многие из существующих исследований, посвященных явлению Брюстера, упускают из рассмотрения поведение фазы отраженного света вблизи идеального пропускания.

Амплитуда отраженной плоской волны представляет собой комплексное число, определяемое величиной (модулем) и аргументом (фазой). Когда величина отражения падает до нуля, аргумент амплитуды становится неопределенным; такие точки в пространстве параметров называются фазовыми сингулярностями.

В настоящий момент растет количество исследований, направленных на изучение фазовых сингулярностей в различных системах. Фазовые сингулярности наблюдали в метаматериалах и метаповерхностях [3], периодических плазмонных наноструктурах [4], а также в планарных системах, содержащих ультратонкие пленки дихалькогенидов переходных металлов [5]. Научный интерес вызван тем фактом, что быстрое изменение фазы рассеянного света вблизи сингулярности предлагает элегантные приложения для аналоговых вычислений, обработки изображений и молекулярного обнаружения с улучшенной

чувствительностью. Тем не менее, фазовые сингулярности, возникающие в простых одноосных средах из-за явления Брюстера, остаются до конца не изученными.

В данной работе теоретически изучаются фазовые сингулярности, возникающие при отражении света от одноосного поглощающего материала с диэлектрическим тензором, охватывающим широкий класс материалов:

$$\overleftrightarrow{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix},$$

где диэлектрическая проницаемость вдоль оптической оси $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{||} = const$ является константой, а в плоскости ей перпендикулярной $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp}$ описывается моделью Лоренца:

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{\infty} + f\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega},$$

где ε_{∞}— высокочастотная диэлектрическая проницаемость, f— сила осциллятора резонансного перехода, ω_0— резонансная частота, γ описывает поглощение в системе.

С помощью аналитического условия нулевого отражения было продемонстрировано возникновение фазовых сингулярностей в коэффициенте отражения p-поляризованной волны в пространстве угла падения и частоты падающей волны. Исследовано поведение фазовых сингулярностей в выбранном пространстве параметров в зависимости от материальных параметров диэлектрика, которые как влияют на положение сингулярностей в пространстве, так и могут приводить к качественно различным случаям. Так, на рис. 1 показано, что значение высокочастотной диэлектрической проницаемости влияет на количество возникающих сингулярностей; кроме того, наличие поглощение является необходимым условием для наблюдения фазовых сингулярностей в такой системе.

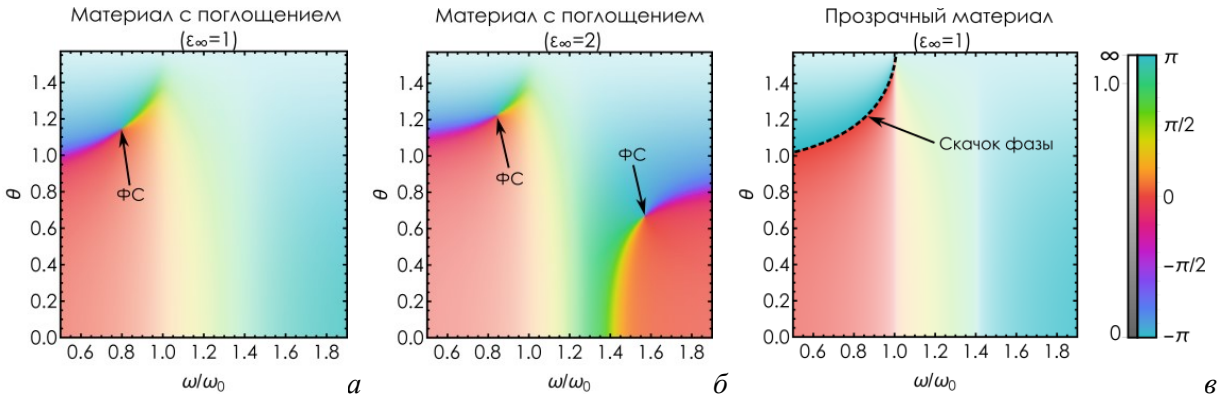


Рис. 1. Комплексный коэффициент отражения p-поляризованной волны от одноосного материала, характеризуемого параметрами $\varepsilon_{\infty} = 1, f = 1, \gamma = 0{,}1\omega_0, \varepsilon_{||} = 2 + 0{,}5i$ (*а*). То же, что и (*а*), для $\varepsilon_{\infty} = 2$ (*б*). То же, что и (*а*), для прозрачного материала $\gamma = 0, \varepsilon_{||} = 2$ (*в*)

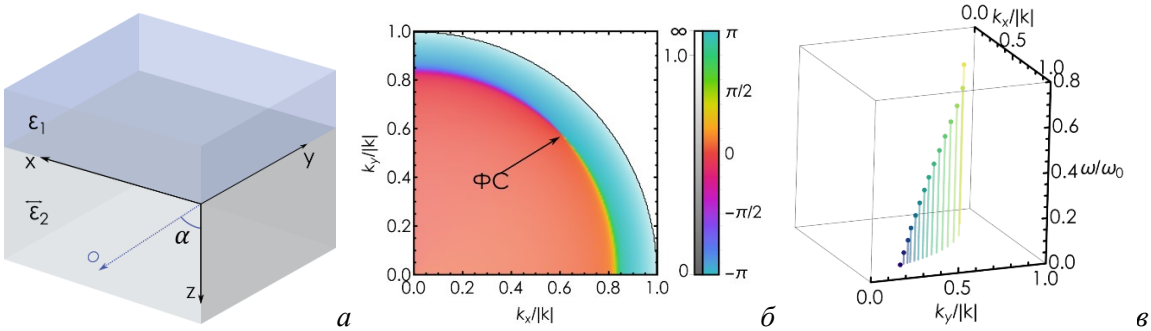


Рис. 2. Схема задачи рассеяния (*а*). Коэффициент отражения p-поляризованной волны (*б*), связывающий амплитуды компонент падающей и отраженной волн одинаковой поляризации, от одноосного материала с оптической осью, повернутой на угол $\sin\alpha = 0{,}6$ и параметрами $\varepsilon_{\infty} = 1, f = 1, \gamma = 0{,}1\omega_0, \varepsilon_{||} = 2 + 0{,}5i$, построенной для частоты $\omega = 0{,}1\omega_0$. (*в*) Траектория фазовой сингулярности в пространстве $\mathbf{k}_{||}$- ω

Заключительная часть работы посвящена исследованию фазовых сингулярностей в пространстве тангенциальных компонент волнового вектора падающей волны k_x-k_y на фиксированной частоте, что является важным в контексте таких практических приложений, как аналоговые вычисления и обработка изображений [6]. На рис. 2 показано, что нарушение аксиальной симметрии в системе посредством поворота оптической оси приводит к возникновению изолированного нуля функции отклика, сопровождающегося сингулярностью фазы в пространстве $k_x - k_y$. Возможность реализации данного эффектра в реальных материалах проиллюстрирована на примере дихалькогенидов переходных металлов.

Литература

1. *Baranov D. G.* [et al.]. Perfect interferenceless absorption at infrared frequencies by a van der Waals crystal // Phys. Rev. B. 2015. V. 92(20): 201405.
2. *Baranov D. G., Vinogradov A.P., Simovski C. R.* Perfect absorption at Zenneck wave to plane wave transition // Metamaterials. 2012. V. 6(1-2). P. 70-75.
3. *Tsurimaki Y.* [et al.]. Topological engineering of interfacial optical Tamm states for highly sensitive near-singular-phase optical detection // ACS Photonics. 2018. V. 5(3). P. 929–938.
4. *Berkhout A., Koenderink A. F.* Perfect absorption and phase singularities in plasmon antenna array etalons //ACS Photonics. 2019. V. 6(11). P. 2917–2925.
5. *Ermolaev G*. [et al.]. Topological phase singularities in atomically thin high-refractive-index materials // Nat. Commun. 2022. V. 13(1): 2049.
6. *Zhu T*. [et al.]. Topological optical differentiator // Nat. Commun. 2021. V. 12(1): 680.

УДК 535.243, 535.8, 539.25

Синтез гетероструктурных наночастиц методом лазерной абляции для применения в фотокатализе

Д. В. Дюбо, И. С. Казанцев, Г. И. Целиков, И. В. Мартынов

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Область синтеза наноматериалов находится в процессе развития, при этом растет потребность в инновационных технологиях, которые отличаются от традиционных мокро-химических методов и обладающих уникальными свойствами. Лазерная абляция, универсальный и гибкий подход к созданию наноматериалов, набирает обороты благодаря своей способности создавать различные структуры, размеры и формы, включая сложные гибридные материалы, такие как гибридные частицы, core-shell частицы и core-satellite частицы. Эта техника, известная как лазерная абляция в жидкости (LAL), не только проста в применении, но и позволяет манипулировать широким диапазоном экспериментальных параметров и получать наночастицы с высоким показателем преломления [1].

Изменяя такие переменные, как состояние исходного материала — от флейков и порошков до твердых кристаллов, а также варьируя такие параметры, как выбор растворителя, мощность лазера, положение фокуса и включение различных добавок, можно с точностью настраивать характеристики полученных в результате наноматериалов. Универсальность LAL открывает возможности для адаптации материалов к конкретным задачам, тем самым расширяя возможности нанонауки [2].

Сегодня существует большой интерес к плазмонным структурам. Благодаря сильному плазмонному поглощению и отличной биосовместимости, плазмонные наноструктуры являются одними из лучших кандидатов для фотоакустической биовизуализации, фототермической терапии и фотокатализа. Однако настройка спектрального положения локализованного поверхностного плазмонного резонанса в среднем ИК-диапазоне требует реализации сложных плазмонных наноархитектур, таких как стержни и ядра-оболочки [3]. Здесь мы представляем основанную на лазерной абляции методику изготовления наносистем типа core-satellite, сочетающих ядро с высоким показателем преломления и плазмонную оболочку. Мы демонстрируем ее применимость для создания гибридных наночастиц TiO_2@Ag [4], и в дальнейшем она может быть распространена на широкий спектр материалов с высоким показателем преломления, включая ван-дер-ваальсовы кристаллы. Такие наночастицы с ядром-спутником обеспечивают интенсивное плазмонное поглощение в спектральном диапазоне 600–1000 нм, обладая диаметром меньше 50 нм, и таким образом, могут быть использованы в приложениях тераностики и фотокаталитической генерации водорода.

Для синтеза наночастиц мы использовали систему с диодной накачкой Teta 10 («Авеста», Россия), генерирующую импульсы длительностью 270 фс. Система работала при энергии импульса 100 мкДж на длине волны 1030 нм с частотой импульсов 1 кГц. Лазерный луч фокусировался вглубь раствора на расстоянии 7.5 мм от поверхности жидкости. Сам раствор представлял из себя смесь готовых наночастиц TiO_2 (производитель Sigma Aldrich) с концентрацией частиц 0.2 мг/мл и водного раствора $AgNO_3$ с концентрацией 0.2 мг/мл. Готовый композит получался путем воздействия на данный раствор упомянутой выше системы на протяжении 15 минут и при непрерывном перемешивании при помощи магнитной мешалки.

В результате были получены частицы TiO_2@Ag типа core-satellite, за счет восстановления серебра из раствора до металлической фазы, что подтверждается снимками, полученными при помощи просвечивающего электронного микроскопа (TEM) на рис. 1. Они были протестированы в реакции разложения метиленового синего и продемонстрировали почти 15-кратное увеличение эффективности по сравнению с обычными частицами TiO_2, что показано на рис. 2*а*. Также были сняты спектры экстинкции коллоидных растворов, представленные на рис. 2*б*, и демонстрирующие, что итоговый спектр TiO_2@Ag представляет собой не просто сложение спектров его составляющих (пунктирная кривая), и что имеет место плазмонное поглощение за счет наноструктур из серебра.

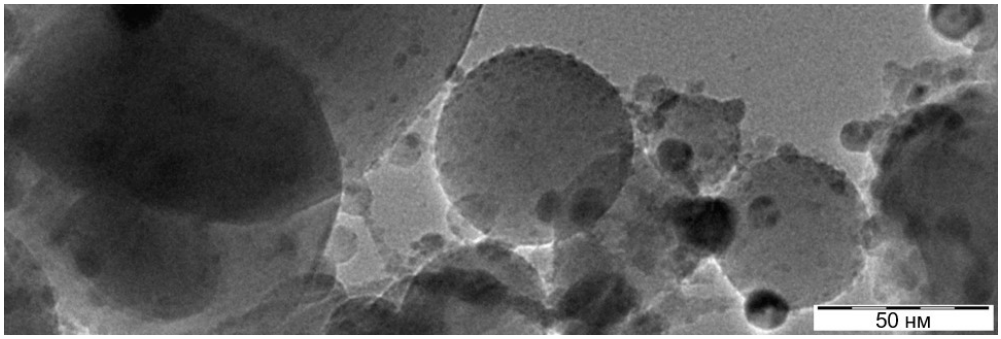


Рис. 1. Снимок TEM частиц TiO_2@Ag

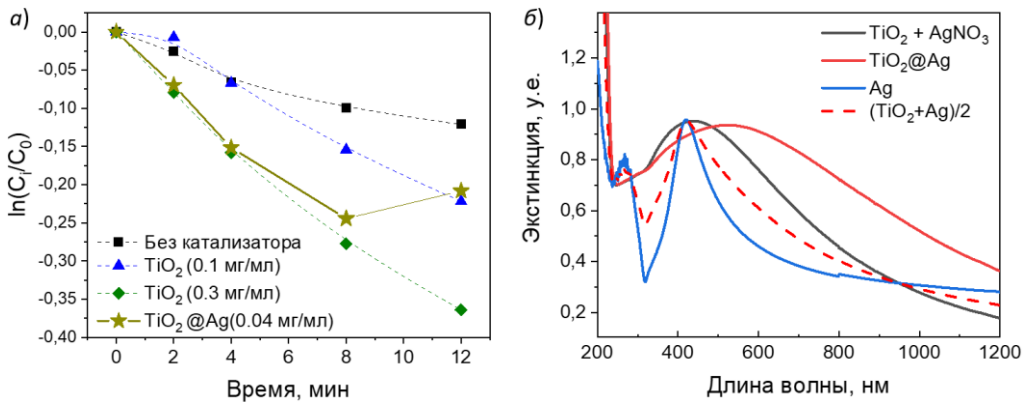


Рис. 2. Сравнение скорости разложения метиленового синего при разных катализаторах (*а*) и спектра экстинкции раствора до и после фрагментации (*б*)

Таким образом, была продемонстрирована возможность использования метода LAL для синтеза гибридных наноструктур типа core-satellite с возможностью управления параметрами получаемых нанообъектов, такими как диаметр и состав. Кроме того, была показана применимость данного метода для синтеза гибридных металл-диэлектрических наночастиц на основе таких материалов как МКсены, дихалькогениды переходных металлов и серебро.

Работы выполнены при поддержке базового финансирования по программе «Приоритет-2030».

Литература

1. *Tselikov G. I.* [et al.]. Transition metal dichalcogenide nanospheres for high-refractive-index nanophotonics and biomedical theranostics // PNAS. 2022. V. 119(39): e2208830119. DOI: 10.1073/pnas.2208830119.
2. *Panova D. A.* [et al.]. Broadband optical properties of Ti_3C_2 MXene revisited // Opt. Lett. 2024. V. 49(1). P. 25-28. DOI: 10.1364/OL.503636.
3. *Cole J. R.* [et al.]. Photothermal efficiencies of nanoshells and nanorods for clinical therapeutic applications // J. Phys. Chem. C. 2009. V. 113(28). P. 12090–12094. DOI: 10.1021/jp9003592.

4. *Gurbatov S.* [et al.]. Ag-Decorated Si Microspheres Produced by Laser Ablation in Liquid: All-in-One Temperature-Feedback SERS-Based Platform for Nanosensing // Materials. 2022. V. 15(22): 8091. DOI: 10.3390/ma15228091

УДК 537.874, 537.876

Экситон-поляритоны в Ми-войдах

Е. Ю. Рябков, Д. Г. Баранов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Поведение диэлектрических систем под действием электромагнитного излучения, включая их связанные состояния, является одним из базовых предметов интереса фотоники [1]. Примером традиционной для изучения системы являются сферические наночастицы, контроль света в которых ныне не таит в себе принципиальных неотвеченных вопросов [2,3,4]. Однако такой объект, как вакуумные полости в диэлектрических структурах, не привлекал внимания исследователей до недавнего времени [5]. Сферические полости, описываемые теорией Ми [6] (в связи с этим они же — ми-войды), демонстрируют традиционные для диэлектриков резонансные свойства, зависящие от материалов, в которых они образованы.

В настоящей работе мы теоретически исследуем данные зависимости. Начиная со сферических полостей в недисперсных диэлектриках, мы продемонстрировали возможность формирования гибридных состояний — поляритонов — при наличии малой дисперсии в войдах. В результате исследования полостей в лоренцевских материалах мы обнаружили резонансный рост добротности в соответствующих системах в зависимости от параметров окружения. Результаты данной работы позволят модифицировать подходы к дизайну материалов, а также откроют новые горизонты в вопросах контроля электромагнитного излучения в наноструктурах.

Литература

1. *Saleh B. E. A., Teich M. C.* Fundamentals of Photonics. — Hoboken: Wiley, 1991.
2. *Tserkezis C.* [et al.]. Self-hybridisation between interband transitions and Mie modes in dielectric nanoparticles // Nanophotonics 2024:781.
3. *Fan X., Zheng W., Singh D.*, Light scattering and surface plasmons on small spherical particles // Light Sci Appl 2014. V. 3: 179.
4. *Kuznetsov A. I.* [et al.]. Optically resonant dielectric nanostructures // Science 2016. V. 354: 2472.
5. *Hentschel M.* [et al.]. Dielectric Mie voids: confining light in air // Light Sci Appl 2023. V. 12: 3.
6. *Mie G.*, Beiträge zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallösungen // Ann. der Phys. 1908. V. 330. P. 377–445.

УДК 538.911

Влияние некритических степеней свободы на ротационные фазовые переходы в перовскитах

***Е. Г. Троценко*[1,2], *М. В. Таланов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Южный федеральный университет

Соединения и твердые растворы со структурой типа перовскита ABX_3 представляют собой обширное семейство многофункциональных материалов, которые применяются в различных технических областях благодаря их разнообразным физическим и химическим свойствам, таким как фотоэлектричество, сегнетоэлектричество, пьезоэлектричество, ионная проводимость, колоссальное магнитосопротивление и фотокаталитическая активность. Преобладающим типом структурных искажений в перовскитах являются наклоны (ротации) анионных октаэдров BX_6, которые существенно влияют на многие физические свойства [1]. Фазовые переходы, обусловленные наклонами октаэдров, также связаны с появлением дополнительных некритических структурных степеней свободы, описываемых вкладами вторичных (несобственных) параметров порядка. Целью данного исследования явилось установление влияния некри-

тических степеней свободы на формирование низкосимметричных перовскитоподобных структур, образованных наклонами октаэдров.

Нами был проведен теоретико-групповой анализ всех возможных низкосимметричных фаз, образованных с кубического перовскита за счет Глейзеровских наклонов октаэдров [2], которые в рамках теории фазовых переходов Ландау описываются двумя критическими параметрами порядка, преобразующимися по неприводимым представлениям M_2^+ и R_5^- [3]. Для каждой из 15 фаз был получен полный конденсат параметров порядка, который кроме критических включает и вторичные некритические параметры порядка. Нами проведен детальный анализ возможных типов дополнительных искажений структуры, смещений и упорядочений атомов, возникающих за счет вторичных параметров порядка. Установлено, что вторичные параметры порядка обуславливают смещения атомов только в A- и (или) X- подрешетках структуры перовскита. Кроме того, нами показано, что формирование всех низкосимметричных структур сопровождается сегнетоэластическими деформациями, за исключением фазы с пространственной группой $Im\bar{3}$ [4]. Впервые предложен теоретико-групповой критерий для идеально жестких наклонов (rigit unit [5]), использование которого позволило выделить три фазы с пространственными группами P4/mbm, I4/mcm, $R\bar{3}c$. Формирование соответствующих структур может быть описано как наклоны идеально жестких октаэдров, для всех остальных низкосимметричных фаз это приближение некорректно из-за вклада от нектрических параметров порядка в дополнительные искажения октаэдра BX_6.

Используя комбинацию теоретико-группового и кристаллографического подходов, мы построили модифицированное древо Берникгаузена, описывающее иерархию кристаллических структур и им соответствующие параметры порядка. Объединение взаимодополняющих методов способствовало выявлению не только иерархических корреляций группа-подгруппа, но и отображению вариативности путей формирования низкосимметричных фаз.

В качестве демонстрации роли некритических степеней свободы на ротационные фазовые переходы нами был проведен теоретико-групповой анализ экспериментальных данных нейтронографии архетипичного перовскита $CaTiO_3$ [6]. Выполненная декомпозиция атомных смещений на вклады от критических и нектритических структурных степеней свободы позволила построить температурные зависимости первичных и вторичных параметров порядка. Обнаружено отклонение температурного поведения первичных параметров порядка от характерного для фазовых переходов I и II рода, что связывается нами с вкладами от более высоких степеней в термодинамическом потенциале.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 22-72-10022).

Литература

1. *Woodward P. M.* Octahedral Tilting in Perovskites. II. Structure Stabilizing Forces // Acta Cryst. 1997. V. 53 P. 44–66.
2. *Glazer A.M.* The classification of tilted octahedra in perovskites // Acta Cryst. 1972. V. 28 P. 3384–3392.
3. Howard C.J. [et al.]. Group-Theoretical Analysis of Octahedral Tilting in Perovskites // Acta Cryst. 1998. V. 54. P. 782–789.
4. *Talanov M. V.* [et al.]. Proper and improper ferroelastics with perovskite-derived structures // Ferroelectrics. 2023. V. 612 P. 36–44.
5. *Campbell B. J.* [et al.]. Theoretical and computational improvements to the algebraic method for discovering cooperative rigid-unit modes // J. Appl. Cryst. 2021. V. 54. P. 1664–1675.
6. *Masatomo Y.* [et al.]. Structural phase transition and octahedral tilting in the calcium titanate perovskite $CaTiO_3$ // Solid State Ionics. 2009. V. 180 P. 120–126.

УДК 538.975

Химическая и термическая устойчивость нанопленок Bi/InAs(111)A(2x2)

***И. А. Бетке*[1,2], *Н. Ю. Соловова*[1,2]**

[1]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
[2]Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН

Для висмута, самого тяжелого из нерадиоактивных элементов, характерно сильное спин-орбитальное взаимодействие. Это перспективно для создания приборов, основанных на спиновой степени свободы. Тонкие пленки висмута могут обладать разнообразной кристаллической и электронной структурой. Так, ранее был изучен рост тонких пленок Bi/InAs(111)A [1]. В статье показано, что на поверхности InAs

формируются квазиодномерные цепочки из димеров висмута с ненулевой спиновой поляризацией их электронных состояний.

Так как ранее пленки исследовались *in situ* в сверхвысоком вакууме, то для дальнейшей разработки приборов необходимо изучить стабильность синтезированных структур в атмосфере. Помимо этого, для последующего создания структур металл-диэлектрик-полупроводник на данные пленки планируется наносить диэлектрический слой. Поскольку обычно в процессе атомно-слоевого осаждения образцы нагреваются до 200-300°C, то нужно также изучить термическую стабильность пленок.

Цель работы — экспериментально изучить химическую и термическую устойчивость сверхтонких пленок Bi/InAs(111)A в атмосфере азота и воздуха.

Работа выполнялась на установке ARPES FlexPS (SPECS GmbH, Германия), позволяющей в пределах одной камеры синтезировать образцы и анализировать их методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), дифракции медленных электронов (ДМЭ). рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Висмут напылялся из эффузионной ячейки Кнудсена на реконструированную поверхность InAs(111)A(2x2). Анализ химического состава и структуры пленок проводился методом РФЭС. Качество, периодичность выращенных структур оценивались методом ДМЭ.

Методом молекулярно-лучевой эпитаксии выращено два образца толщиной 4 Å и 14 Å. Показано, что в атмосфере азота (давление 1 атм) с содержанием кислорода менее 1 ppm происходит полное окисление пленки толщиной 4 Å без наблюдаемых изменений материала подложки. В пленке толщиной 14 Å происходит только частичное окисление висмута, выраженное в химическом сдвиге двойного пика Bi4f (рис. 1). Последующая экспозиция образцов на воздухе не привела к дальнейшему окислению.

Таким образом, поскольку в образце большой толщины присутствуют линии не связанного с кислородом висмута, предполагается, что оксидный слой стал защитой тонкой неокисленной пленки вблизи поверхности. Методом угловых измерений РФЭС оценена толщина такой пленки.

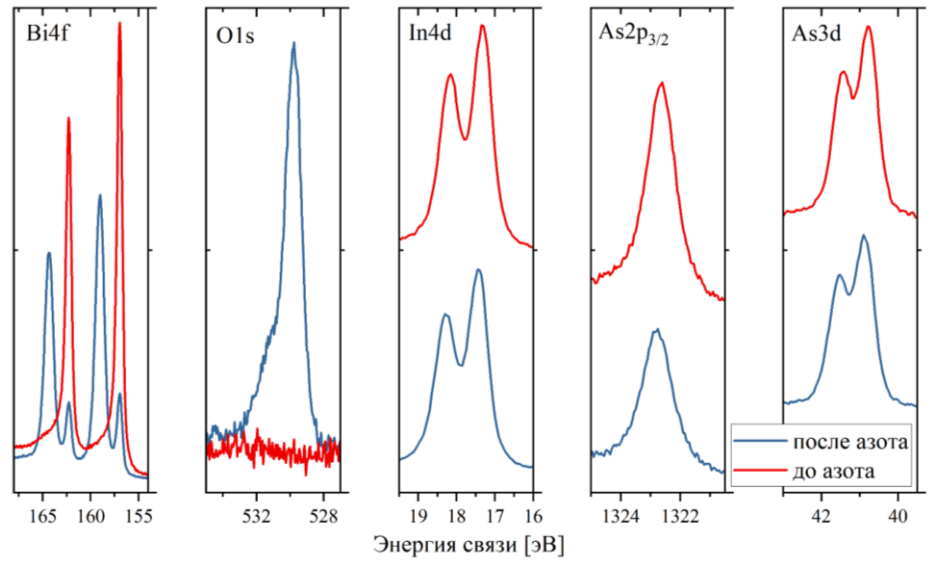


Рис. 1. Характерные пики фотоэмиссии до и после экспозиции образца толщиной 14 Å в атмосфере азота

Изучение термической стабильности показало, что нагрев в вакууме частично окисленной пленки Bi/InAs(111)A при температуре ~50 °C не приводит к разрушению ее структуры. Однако температура ~300 °C является критической. Прогрев при ней привел к частичному восстановлению висмута, диффузии кислорода к подложке, окислению индия и мышьяка

Литература

1. *Mihalyuk A. N.* [et al.]. Emergence of quasi-1D spin-polarized states in ultrathin Bi films on InAs (111) A for spintronics applications //Nanoscale. 2024. V.16(3). P. 1272–1281.

УДК 539.23

ГКР-подложки варьируемой морфологии на основе «плазмонных чернил» AgNP/GO

***И. А. Завидовский*[1], *Н. М. Белозерова*[1], *М. В. Самоделова*[2], *Е. Ю. Афонюшкина*[2], *И. С. Казанцев*[1], *Д. В. Дюбо*[1], *О. О. Капитанова*[1,2], *И. А. Веселова*[2], *А. В. Арсенин*[1], *С. Новиков*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Московский государственный университет, химический факультет

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР-спектроскопия) — универсальный неинвазивный вид спектроскопии, позволяющий выявлять колебательный отклик исследуемых образцов с высоким пространственным разрешением — широко используется для анализа образцов и сенсинга. Возможность идентификации молекулярных «отпечатков пальцев» позволяет применять данный метод для решения задач медицинской диагностики, криминалистики, контроля качества на производстве и пищевой безопасности. В то же время, низкое сечение эффекта комбинационного рассеяния, ограничивающее чувствительность КР-спектроскопии, может быть увеличено при помощи реализации эффекта гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). Эффект ГКР, возникающий при взаимодействии аналита с наноструктурированными плазмонно-активными поверхностями. Это позволяет детектировать при помощи ГКР-спектроскопии вплоть до единичных молекул [1].

В качестве ГКР-активных подложек преимущественно применяются наноматериалы на основе благородных металлов — серебра, золота [2]. В настоящей работе представлен подход, позволяющий наносить ГКР-активные покрытия варьируемой морфологии путем осаждения «плазмонных чернил» при помощи микродозаторов. В качестве плазмонно-активного наноматериала были использованы композитные структуры AgNP/GO (серебряные наночастицы/частицы оксида графена), в которых оксид графена позволяет снизить люминесценцию аналита [3].

Водный раствор AgNP/GO был приготовлен при помощи метода Леопольда-Лендла [4]. Оксид графена был синтезирован при помощи модифицированного метода Хаммерса [5]. Синтез наночастиц серебра, взаимодействующих с GO, проводили путем добавления раствора оксида графена в реакционную смесь.

«Плазмонные чернила» изготавливались из синтезированного раствора AgNP/GO при помощи центрифугирования исходного раствора в течение 10 минут в режиме 6000 оборотов в минуту и дальнейшего удаления супернатанта, за которым следовало перемешивание полученного раствора в ультразвуковой ванне в течение 2 минут. После этого раствор погружался в дозатор, подготовленный на основе стержней коммерчески доступных гелевых ручек. ГКР-подложки контролируемой морфологии на основе AgNP/GO были нанесены на картон.

Спектры комбинационного рассеяния были сняты при помощи спектрометра Horiba LabRAM HR Evolution (HORIBA Ltd., Kyoto, Japan). В качестве детектируемого аналита был использован родамин 6G в растворе этилового спирта.

На рис. 1 продемонстрирована возможность нанесения при помощи гелевой ручки, заправленной «плазмонными чернилами» AgNP/GO. Во вставке приведено изображение наночастиц серебра, полученное при помощи сканирующего электронного микроскопа. Согласно полученным данным, средний размер частиц составляет (37 ± 7) нм.

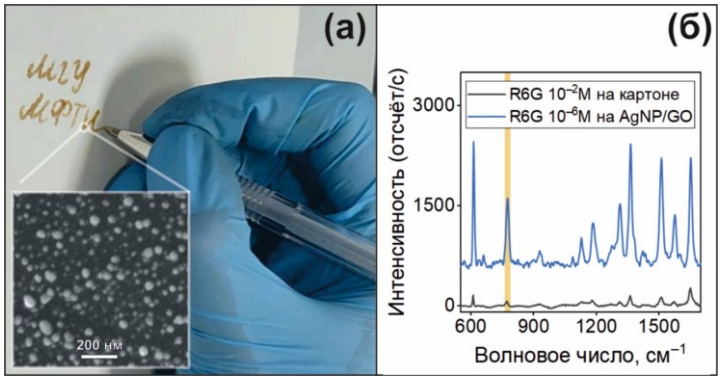


Рис. 1. Фотография, демонстрирующая возможность нанесения покрытий на основе плазмонных чернил AgNP/GO варьируемой морфологии (*а*). Во вставке представлен результат сканирующей электронной микроскопии серебряных наночастиц. ГКР-спектры родамина 6G (*б*) в концентрации 10^{-2} М, осажденного на картон, не содержащий плазмонно-активных наночастиц, снятые при относительной мощности 0.1% (черная линяя), и ГКР-спектры родамина 6G в концентрации 10^{-6}М , осажденного на ГКР-активную подложку AgNP/GO, снятые при относительной мощности 0.01% (синяя линяя)

На рис. 1*б* представлены КР-спектры родамина 6G. Для оценки параметра усиления (enhancement factor, EF) была измерена амплитуда пика 774 $см^{-1}$ (выделен на рисунке) образцов. Было показано, что EF(AgNP/GO) составляет порядка $(1{,}1–1{,}3)\times10^6$. При этом для ГКР-подложек, нанесенных путем drop-casting синтезированных химически коллоидных суспензий на картон, EF составил порядка $(0{,}6–1{,}0)\times10^5$.

Рассмотренный подход является эффективным методом создания ГКР-активных подложек контролируемого размера и морфологии. Нанесение «плазмонных чернил» при помощи распространенных микродозаторов открывает возможности для печати комплексных ГКР-сенсоров, в которых различные «картриджи» будут соответствовать плазмонно-активным частицам, функционализированным для селективного взаимодействия с выбранными аналитами. «Набор» таких картриджей позволит изготавливать ГКР-подложки для комплексных диагностических процедур.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00152, https://rscf.ru/project/24-22-00152/.

Литература

1. *Haque Chowdhury M. A.* [et al.]. Flexible, stretchable, and single-molecule-sensitive SERS-active sensor for wearable biosensing applications // RSC Adv. 2023. V. 13. P. 20787–20798.
2. *Streletskiy O.* [et al.]. Tailoring of the Distribution of SERS-Active Silver Nanoparticles by Post-Deposition Low-Energy Ion Beam Irradiation. // Materials. 2022. V. 15: 7721.
3. *Samodelova M. V.* [et al.]. Plasmonic features of free-standing chitosan nanocomposite film with silver and graphene oxide for SERS applications // Nanotechnology. 2022. V. 33: 335501.
4. *Leopold N.*, *Lendl B.* A New Method for Fast Preparation of Highly Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Active Silver Colloids at Room Temperature by Reduction of Silver Nitrate with Hydroxylamine Hydrochloride // J. Phys. Chem. B. 2003. V. 107. P. 5723–5727.
5. *Marcano D. C.* [et al.]. Improved Synthesis of Graphene Oxide // ACS Nano. 2010. V. 4. P. 4806–4814.

УДК 544.228

Поляризационная рамановская спектроскопия кристаллов $CrCl_3$ и GeS

И. Ю. Титов, И. А. Завидовский, А. С. Славич, М. К. Татмышевский, М. А. Кащенко, А. В. Арсенин, С. М. Новиков

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нанофотоника является быстро развивающейся областью физики. Одним из методов улучшения и расширения возможностей современных фотонных устройств является использование структур с анизотропными диэлектрическими свойствами, полученных из ван-дер-ваальсовых (vdW) материалов, в качестве их элементов. Анизотропия данных материалов возникает из-за различий между ковалентными связями внутри слоя и слабыми межслойными ван-дер-ваальсовыми взаимодействиями. В данной работе

исследуются оптические свойства ван-дер-ваальсовых кристаллов $CrCl_3$ и GeS. Слоистые тригалогениды переходных металлов, в число которых входит $CrCl_3$, являются важным семейством ван-дер-ваальсовых магнитов и десятилетиями изучались как прототипы магнитных изоляторов [1, 2], а также — как платформа для квазидвумерного магнетизма [3, 4]. Основное внимание исследователей в последние годы было сосредоточено на изучении магнитной структуры сверхтонких образцов данных материалов и межслойного обменного взаимодействия. В ряде последних работ с этой целью измерялось магнитосопротивление и другие аспекты электронного транспорта [5, 6]. Также активно изучались фазовые переходы тригалогенидов переходных материалов. В то же время, оптические свойства кристалла $CrCl_3$ детально не исследовались. По сравнению с хлоридом хрома (III), GeS не имеет ярко выраженных магнитных свойств. Однако в ряде работ было показано, что данный кристалл имеет высокую подвижность зарядов и существенную светочувствительность. Сочетание данных свойств позволяет использовать сульфид германия для создания компонентов фотодетекторов [7].

С помощью механической эксфолиации из кристаллов $CrCl_3$ и GeS были получены флейки с различными толщинами. Первоначальная характеристика структуры чешуек и их однородность были оценены оптическим микроскопом Soptop RX50M. Для более детального анализа фазового состава материалов использовался конфокальный рамановский микроскоп Horiba LabRam HR Evolution. Были использованы длины волн возбуждения 532 нм и 632,8 нм. Полученные спектры представлены на рис. 1. По результатам исследования было показано, что образцы представляют собой однородные по толщине и структуре кристаллы, не содержащие дефектов. Также было выявлено, что интенсивность рамановских спектров существенно зависит от длины волны облучения. Помимо этого, было показано, что оба материала могут претерпевать необратимые структурные изменения при высоких интенсивностях лазерного облучения. Для $CrCl_3$ данное явление наблюдалось при мощности излучения более 255,6 мВт. Для GeS указанное изменение наблюдалось при мощности излучения 1,06 мВт. Перечисленные выше факты осложняли изучение материалов. Однако в случае сульфида германия данное явление открывает возможность контролируемой модификации морфологии материала с помощью лазера. С этой целью были отобраны дополнительные образцы с толщинами меньше 100 нм, которые затем подвергались лазерному облучению различной длительности и мощности. Полученные углубления анализировались с помощью атомно-силовой микроскопии для определения глубины выжигания. Для анализа индуцированной лазером модификации структуры материалов применялась рамановская спектроскопия.

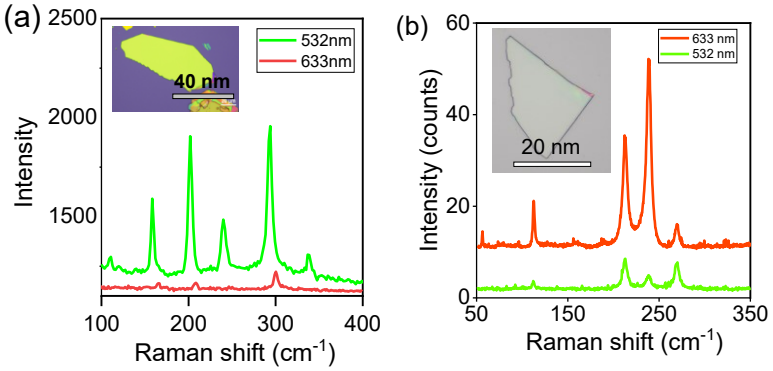


Рис. 1. Рамановский спектр чешуйки $CrCl_3$ (а) и GeS (б) при различных длинах волн возбуждения. Во вставках представлены оптические изображения исследуемых флейков

Кроме этого, в данной работе была рассмотрена взаимосвязь между оптическим и колебательным откликом хлорида хрома (III) и сульфида германия. С этой целью были определены полярные диаграммы линий комбинационного рассеяния сульфида германия и хлорида хрома (III). Также были измерены поляризационные спектры пропускания в диапазоне 400 — 900 нм. Путем сравнения двух методик было определено взаимное расположение оптических и кристаллографических осей.

Таким образом, в данной работе исследовались анизотропные оптические свойства и разрешенные по углу рамановские спектры двух представителей ван-дер-ваальсовых материалов: сульфид германия и хлорида хрома (III). Было определено взаимное расположение оптических и кристаллографических осей данных материалов. Помимо этого, была показана возможность контролируемой модификации морфологии исследуемых материалов при помощи лазерного облучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта # 075-15-2022-1150.

Литература

1. *Dillon J. F., Olson C. E.* Magnetization, resonance, and optical properties of the ferromagnet CrI_3 // J. Appl. Phys. 1965. V. 36. P. 1259–1260.
2. *Cable J. W.* Neutron diffraction investigation of antiferromagnetism in $CrCl_3$ // J. Phys. Chem. Solids. 1961. V. 19. P. 29–34.
3. *Huang B.* Electrical control of 2D magnetism in bilayer CrI_3 // Nat. Nanotechnol. 2018. V. 13. P. 544–548.
4. *Seyler K. L.* Ligand-field helical luminescence in a 2D ferromagnetic insulator // Nat. Phys. 2018 V. 14. P. 277–281.
5. *Klein D. R., MacNeill D., Song Q.* Enhancement of interlayer exchange in an ultrathin two-dimensional magnet // Nature Physics. 2019. V. 15. P. 1255–1260.
6. *Cai X., Song T., Wilson N. P.* Atomically Thin $CrCl_3$: An In-Plane Layered Antiferromagnetic Insulator // Nano Letters. 2019. V. 6. P. 399–3998.
7. *Tan D., Zhang W., Wang X.* Polarization-sensitive and broadband germanium sulfide photodetectors with excellent high-temperature performance // Nanoscale. 2017. V. 9. P. 12425–12431.

УДК 538.958

Полностью оптическое когерентное управление направлением светового пучка с помощью дифракционной решетки

К. А. Мамян, А. Ю. Фролов, А. А. Федянин

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Способность изменять направление распространения оптических пучков является одной из ключевых задач современной фотоники, например, для создания технологий LIDAR или оптической связи в свободном пространстве [1]. Механические и жидкокристаллические устройства, используемые сегодня в этих целях, громоздки и ограничены в скорости. Фотонные платформы позволят увеличить быстродействие и минимизировать размеры устройств. Основные подходы включают в себя использование активных градиентных метаповерхностей, медленного света в волноводах и оптических фазированных массивов [1].

В данной работе представлен альтернативный подход к контролю направления распространения света с помощью дифракционной решетки с плавно изменяющимся периодом (рис. 1). Данная структура характеризуется начальным и конечным периодами и ширинами полос, а также высотой решетки. Используется схема облучения стоячей волной: с противоположных сторон решетки размещаются два источника, излучение которых распространяется под нормалью к решетке и интерферирует в области полос, создавая пучность или узел в определенном сечении решетки [2]. Изменяя сдвиг фазы между источниками, можно сдвигать пучность излучения вдоль решетки, таким образом варьируя период задействованной решетки и меняя направление распространения данного порядка дифракции.

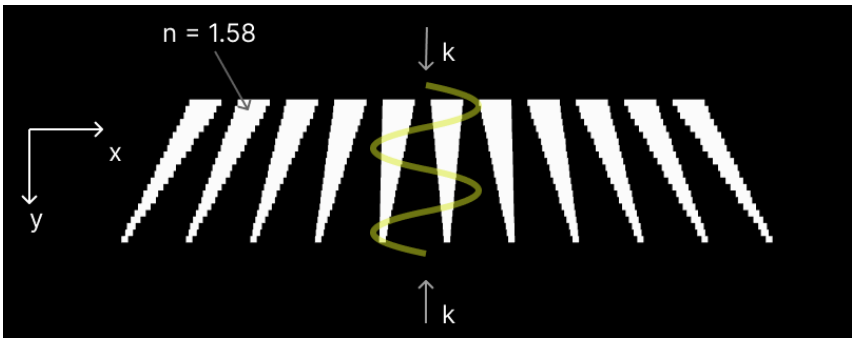


Рис. 1. Схема структуры и освещения в программном пакете Ansys Lumerical FDTD

С целью проверки свойств предложенной структуры были проведены расчеты в программном пакете Ansys Lumerical FDTD, реализующим метод конечных разностей во временной области. Были использованы источники с гауссовым профилем интенсивности на длине волны 1550 нм. Структура имеет следующие параметры: n = 1,58; 11 полос, период изменяется от 3000 нм до 4000 нм, ширина полос от 2000 нм до 400 нм (сверху вниз), высота составляет 400 нм. На рис. 2 цветом отображена зависимость интенсивности первого порядка дифракции от угла дифракции φ и фазового сдвига θ между источниками. Максимум при сдвиге фаз между источниками в 250° при угле дифракции около 28° относится к первому дифракционному порядку задействованной подрешетки с периодом около 3300 нм. Данный максимум плавно сдвигается в

область меньших углов при изменении сдвига фаз между источниками, достигая значения 25° при сдвиге фаз 150°, что соответствует подрешетке с периодом около 3700 нм. Таким образом, за счет изменения сдвига фаз между источниками можно плавно перестраивать направление распространения пучка в диапазоне 25°–29°. Стоит отметить наличие возможности изменять направление дифракционных порядков на большие углы путем увеличения разницы между периодами верхней и нижней решеток.

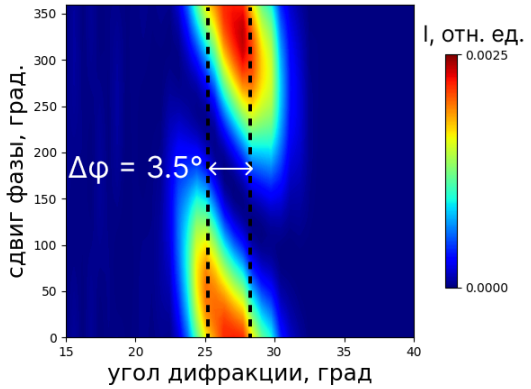


Рис. 2. Зависимость интенсивности первого дифракционного порядка от угла дифракции и сдвига фаз между источниками для рассматриваемой структуры

Литература

1. *Lin S.* [et al]. High-performance optical beam steering with nanophotonics // Nanophotonics 2022. V. 11. P. 2617–2638.
2. *He F.* [et al]. Continuous beam steering by coherent light-by-light control of dielectric metasurface phase gradient // Opt. Express 2020. V. 28. P. 30107–30116.

УДК 535.392, 535-47

Аналитическое описание хиральных зеркал при наклонном падении излучения

К. Д. Алехин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Основной задачей хиральной поляритоники является изучение взаимодействия хирального вещества с электромагнитным излучением. Более точно интерес представляет различие взаимодействия энантиомеров хиральной среды с излучением с заданной круговой поляризацией.

В связи с тем, что разные энантиомеры органических молекул могут иметь различный биологический эффект на организм человека, задача об эффективном детектировании состава их смеси является весьма актуальной для современной медицины [1], и новые открытия в хиральной поляритонике могут помочь в ее разрешении.

В то же время на пути исследований в этой области имеется техническая сложность: чтобы взаимодействие излучения с веществом было эффективным, его необходимо резонансно усилить, но создание резонатора, поддерживающего моду с определенной круговой поляризацией (хирального резонатора) — задача нетривиальная, поскольку любое нерезонансное зеркало при нормальном падении излучения изменяет его круговую поляризацию на противоположную в связи с сохранением тангенциальной компоненты электрического поля.

В ряде работ [2–4] эта сложность была преодолена и разработаны несколько вариантов дизайна резонатора, поддерживающего моду с определенной круговой поляризацией. Все они анализируют случай нормального падения света на зеркало резонатора. В то же время наклонное падение излучения представляет, как минимум, фундаментальный интерес, и в данной работе произведена попытка распространить созданные концепции на случай произвольного угла падения излучения. Большинство работ для теоретического описания используют теорию связанных мод, которая разработана для нормального падения света [5]. Расширение теории связанных мод для наклонного падения в литературе не освещено. В настоящей работе такое расширение было произведено и на его основе создана параметрическая модель хирального резонатора.

Литература

1. *Baranov D. G.* [et al.] Towards Molecular Chiral Polaritonics // ACS Photonics. 2023. V. 10(8). P. 2440-2455. DOI: 10.1021/acsphotonics.2c02011.
2. *Feis J.* [et al.] Helicity-Preserving Optical Cavity Modes for Enhanced Sensing of Chiral Molecules // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124(3): 033201 DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.033201.
3. *Voronin K.* [et al.] Single-Handedness Chiral Optical Cavities // ACS Photonics. 2022. V. 9(8). P. 2652–2659. DOI: 10.1021/acsphotonics.2c00134.
4. *Dyakov S. A.* [et al.] Chiral Light in Twisted Fabry–Pérot Cavities // Adv. Optical Mater. 2024: 2302502. DOI: 10.1002/adom.202302502.
5. *Fan S.* [et al.] Temporal coupled-mode theory for the Fano resonance in optical resonators // J. Opt. Soc. Am. A. 2003 V. 20(3) P. 569–572. DOI: 10.1364/JOSAA.20.000569.

УДК 537.9

Влияние буферного слоя и анодирования на свойства пленок NbTiN, используемых в приемниках терагерцевого излучения

***К. В. Живетьев*[1], *Е. С. Жукова*[1], *Б. П. Горшунов*[1], *А. В. Терентьев*[1], *А. М. Чекушкин*[2], *Ф. В. Хан*[2], *А. В. Худченко*[3], *Н. В. Кинев*[2], *В. П. Кошелец*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН
[3]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Смесители на основе туннельных переходов сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник (СИС) широко используются в радиоастрономии [1], для наблюдения за атмосферой [2], для исследования газов [3] и в биомедицине [4]. В большинстве смесителей используются сверхпроводящие (СП) пленки из ниобия [5, 6]. В данной работе было исследовано влияние буферного слоя оксида алюминия и анодного окисла, необходимых при технологических процессах формирования СИС-переходов и элементов интегральных структур терагерцевого диапазона, на свойства пленок NbTiN

Образцы пленок NbTiN были изготовлены на высокоомной кремниевой подложке с использованием кластерного магнетрона. Буферный слой Al_2O_3 наносился на подложку методом ВЧ-магнетронного распыления мишени Al_2O_3 чистотой 99,95%. Пленка NbTiN была напылена поверх буферного слоя. Слои Al_2O_3 и NbTiN были напылены на одну подложку, которую затем разрезали на четыре части с размерами 7×7 мм^2. Образец № 1 представляет собой пленку NbTiN. Образец № 2 — пленку NbTiN с анодированной поверхностью. Поверхность образца № 3 покрыта алюминием толщиной 7 нм. Образец № 4 аналогичен образцу № 3, но с анодированной поверхностью. Следует также отметить, что образцы № 1 и № 3 имеют на поверхности тонкую (1–2 нм) оксидную пленку, сформировавшуюся из-за взаимодействия с атмосферным кислородом.

Изготовленные образцы были исследованы на спектрометре с временным разрешением Menlo Tera K15. Спектры комплексного (амплитуда и фаза) коэффициента пропускания образцов измерялись в диапазоне частот 0,3–2,0 ТГц и при температурах от 5 К до 300 К. Результаты измерений для образца № 2 представлены точками на рис. 1*а*. Спектры образцов № 1, № 3, № 4 аналогичны и не показаны. Из спектров комплексного коэффициента пропускания с помощью программы TeraCalc рассчитывались спектры действительной части проводимости и диэлектрической проницаемости. Эти спектры обрабатывались по методу наименьших квадратов с применением модели Циммермана [7], в результате чего были получены характеристики пленок и их температурные зависимости: критическая температура T_c, энергия сверхпроводящей щели Δ, Лондоновская глубина проникновения λ_L и статическая проводимость σ_{DC}. Полученные значения T_c, σ_{DC}, Δ_0, λ_0 представлены в табл. 1. Сплошными линиями на рис. 2 показаны: температурная зависимость Δ, полученная по эмпирической формуле

$$\Delta = \Delta_0 \operatorname{th}\left(1.74\sqrt{\frac{T_c}{T}-1}\right), \quad (1)$$

и температурная зависимость λ_L, полученная по формуле двухжидкостной модели сверхпроводимости

$$\lambda_L = \lambda_0\sqrt{1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^4} \quad (2)$$

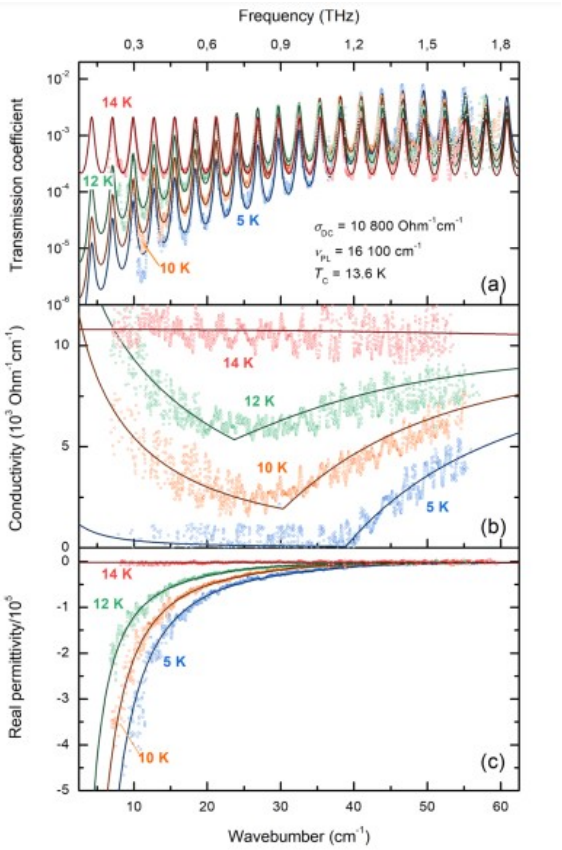


Рис. 1. Спектры: *a* — коэффициента пропускания; *b* — проводимости; *c* —диэлектрической проницаемости анодированной пленки NbTiN на подложке Al_2O_3 (образец № 2). Сплошными линиями показаны зависимости, полученные с применением модели Циммермана [7]

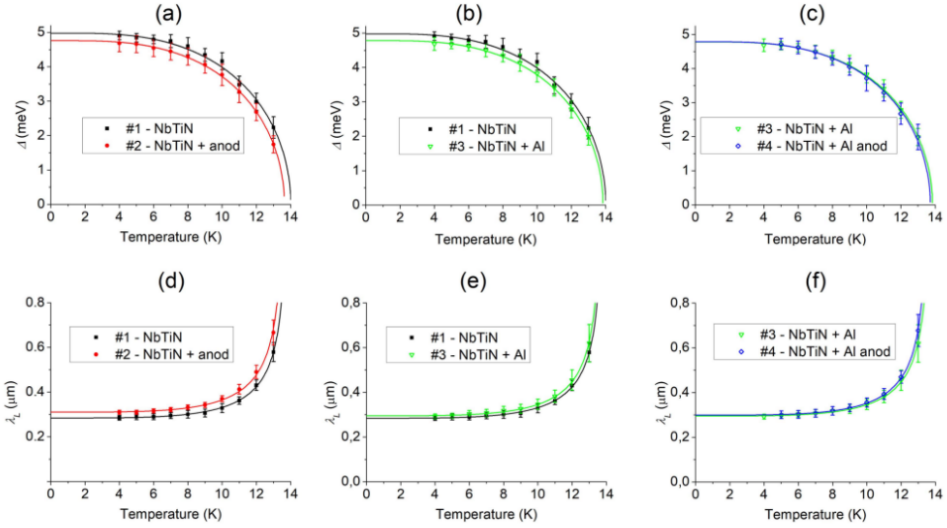


Рис. 2. Графики *a*, *b*, *c* — температурные зависимости величины сверхпроводниковой щели; *d*, *e*, *f* — температурные зависимости Лондоновской глубины проникновения. Сплошными линиями показаны результаты обработки по методу наименьших квадратов с применением эмпирического выражения (1) для *a*, *b*, *c* и выражений двухжидкостной модели сверхпроводимости (2) для *d*, *e*, *f*

Данные на рис. 2 отображают влияние анодирования и поверхностных слоев алюминия на Δ и λ_L. Различия величин Δ и λ_L четырех образцов находятся в пределах экспериментальных погрешностей. На рис. 2*a*, *d* наблюдается небольшой систематический сдвиг между данными, соответствующими образцам № 1 и № 2. Этот сдвиг может быть вызван эффектом близости, ухудшением качества поверхности пленки после анодирования NbTiN, или уменьшением толщины сверхпроводящей пленки. Дополнительный слой алюминия (образец № 3) приводит к несколько меньшей величине Δ и большей величине λ_L по сравнению со значениями для «чистой» пленки NbTiN (образец № 1). Причина связана, скорее всего, с эффектом

близости (рис. 2*b*, *e*). Пленка NbTiN с анодированным алюминием имеет практически те же параметры, что и пленка с алюминием без анодирования (рис. 2*c*, *f*).

Таким образом, буферный слой алюминия и анодирование оказывают лишь незначительное влияние на сверхпроводящие свойства пленок NbTiN. При этом более заметен эффект анодирования пленок NbTiN без слоя алюминия, а менее заметен эффект анодирования слоя алюминия на поверхности NbTiN.

Работа была выполнена при поддержке гранта РНФ 23-79-00019.

Таблица 1. Характеристики образцов NbTiN на подложках Al_2O_3.

Образец	T_c, К	σ_{DC}, 10^4 $(\Omega\times см)^{-1}$	$2\Delta_0$, мэВ	λ_0, нм
№1	13,9	1,09	5,0	283
№2	13,7	1,00	4,7	310
№3	13,8	1,07	4,8	295
№4	13,7	1,01	4,8	300

Литература

1. ALMAObservatory: [Электронный ресурс]. URL: https://almaobservatory.org/ (дата обращения: 01.02.2024).
2. *DeLange G.* [et al.]. Development and characterization of the superconducting integrated receiver channel of the TELIS atmospheric sounder // Supercond. Sci. Technol. 2010. V. 23(4): 045016.
3. *Kinev N. V.* [et al.]. Terahertz spectroscopy of gas absorption using the superconducting flux-flow oscillator as an active source and the superconducting integrated receiver // Sensors. 2020. V. 20(24): 7267.
4. *Baksheeva K. A.* [et al.]. The sub-THz emission of the human body under physiological stress // IEEE Trans. TerahertzSci. Technol. 2021. V. 11(4). P. 381–388.
5. *Garrett J. D.* [et al.]. A 230-GHz endfire SIS mixer with near quantum-limited performance // IEEE Microw. Wireless Compon. Lett. 2022. V. 32(12). P. 1435–1438.
6. *Kojima T.* [et al.]. Three quanta sensitivity superconductor–insulator–superconductor mixer for the 0.78–0.95 THz band // Appl. Phys. Exp. 2009. V. 2(10): 102201.
7. *Zimmermann W.* [et al.]. Optical conductivity of BCS superconductors with arbitrary purity // Physica C: Supercond. 1991. V. 181(1). P. 99–104.

УДК 538.958

Эффект смачивания поверхности в двумерных ван-дер-ваальсовых материалах для роста ультратонких пленок золота

М. С. Миронов, Д. И. Якубовский, И. С. Казанцев, А. В. Арсенин

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В последние годы ультратонкие металлические пленки стали ключевой платформой для различных оптоэлектронных и фотонных приложений. Они обладают высокой оптической прозрачностью, проводимостью и механической стабильностью, что делает их привлекательными для использования в различных устройствах [1–3]. Особый интерес представляют ультратонкие пленки благородных металлов, таких как золото и серебро, толщиной менее 10 нм. Эти пленки были использованы для создания гибких прозрачных электродов, гиперболических метаматериалов, плазмонных волноводов, перестраиваемой плазмоники и других устройств. Однако для обеспечения высоких оптоэлектронных и плазмонных характеристик необходимо, чтобы ультратонкие металлические пленки имели непрерывную структуру [3–8].

В предыдущих исследованиях было показано, что использование двумерных ван-дер-ваальсовых материалов, таких как дихалькогениды переходных металлов (TMD), в качестве смачивающей подложки, может значительно изменить кинетику роста металлических пленок [2, 4, 6, 8]. В частности, дисульфид молибдена (MoS_2) был успешно использован для получения непрерывных ультратонких и ультрагладких золотых пленок малой толщины [2, 7, 8].

Настоящее исследование направлено на исследование влияния эффекта смачивания поверхности на рост пленок золота на различных материалах TMD, включая MoS_2, вольфрам (WS_2), титан (TiS_2) и диселенид молибдена ($MoSe_2$). Мы исследовали процесс роста пленок золота на этих материалах и сравнили результаты с пленками, выращенными на стандартных подложках, таких как оксид кремния (SiO_2).

Используя методы атомно-силовой микроскопии и сканирующей электронной микроскопии, мы провели подробный анализ морфологии поверхности ультратонких пленок золота на различных материалах TMD. Наши результаты показывают, что пленки золота на MoS_2, WS_2 и TiS_2 демонстрируют почти

непрерывное покрытие поверхности с минимальными пустотами, в то время как на $MoSe_2$ наблюдается морфология просачивающейся сетки. Кроме того, мы обнаружили, что пленки золота на TMD имеют более гладкую поверхность по сравнению с пленками на стандартных подложках. Эти результаты подчеркивают важность использования двумерных материалов TMD в качестве смачивающих подложек для роста ультратонких металлических пленок с высокой качественной поверхностью. Дальнейшие исследования в этой области могут привести к разработке новых оптоэлектронных и фотонных устройств с улучшенными характеристиками.

Литература

1. *Bi Y. G*. [et al.] Ultrathin Metal Films as the Transparent Electrode in ITO-Free Organic Optoelectronic Devices // Adv. Opt. Mater. 2019. V. 7(6): 1800778.
2. *Volkov V. S.* [et al.] Ultra-thin gold films: towards 2D metals for photonic and optoelectronic applications // J Phys Conf Ser. 2020. V. 1461(1): 012184.
3. *Yun J.* Ultrathin Metal films for Transparent Electrodes of Flexible Optoelectronic Devices // Adv. Funct. Mater. 2017. V. 27 (18): 1606641.
4. *Yakubovsky D. I.* [et al.] Ultrathin and Ultrasmooth Gold Films on Monolayer MoS2 // Adv. Mater. Interfaces. 2019. V. 6 (13): 1900196.
5. *Huo P*. [et al.] Hyperbolic Metamaterials and Metasurfaces: Fundamentals and Applications // Adv. Opt. Mater. 2019. V. 7(14): 1801616.
6. *Tatarkin D. E.* [et al.] Surface-Enhanced Raman Spectroscopy on Hybrid Graphene/Gold Substrates near the Percolation Threshold // Nanomaterials. 2020. V. 10 (1): 164.
7. *Yakubovsky D. I.* [et al.] Scanning Near-Field Optical Microscopy of Ultrathin Gold Films // Nanomaterials. 2023. V. 13(8): 1376.
8. *Mironov M.* [et al.] Ultrathin and Ultrasmooth Gold Films on van der Waals Materials // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2023. V. 87 (Suppl 3). P. S416–S420.

УДК 538.958

Определение оптических констант анизотропного в плоскости двумерного материала методом спектральной эллипсометрии

М. К. Татмышевский, А. С. Славич

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Дихалькогениды переходных металлов (TMDC) представляют собой семейство двумерных ван-дер-ваальсовых слоистых материалов и обладают исключительными оптическими свойствами. Эти свойства позволяют использовать эти материалы в широком спектре различных приложений: фотодетекторах, излучающих устройствах, устройствах, использующих топологические сингулярности, наноразмерных ми-резонаторах и многих других [1, 2].

Среди семейства дихалькогенидов переходных металлов материалов можно выделить материалы, обладающие низкой кристаллической симметрией. Такие материалы с точки зрения оптики представляют собой двуосные кристаллы. Эффект двулучепреломления в них наблюдается не только при распространении света под углом к оси, перпендикулярной слоям, но и вдоль этой оси, т. е. помимо анизотропии вне плоскости проявляется так же анизотропия в плоскости. Это значительно усложняет взаимодействие таких материалов со светом, что в свою очередь ведет к трудностям в определении оптических констант этих материалов. Однако использование таких материалов открывает новые возможности для нанофотоники [3].

В данной работе исследованы оптические свойства дисульфида германия (GeS_2) в широком диапазоне длин волн. Оптические константы данного материала получены методом спектральной эллипсометрии и дополнительно подтверждены с помощью поляризационной микроскопии пропускания.

Литература

1. *Thakar K., Lodha S.* Optoelectronic and photonic devices based on transition metal dichalcogenides // Materials Research Express. 2020. V. 7(1): 014002.
2. *Wang J.* [et al.] Anisotropic Low-Dimensional Materials for Polarization-Sensitive Photodetectors: From Materials to Devices // Advanced Optical Materials. 2022. V. 10(6): 2102436.
3. *Ermolaev G.* [et al.] Van Der Waals Materials for Subdiffractional Light Guidance // Photonics. 2022. V. 9(10): 744.

УДК 538.911

Исследование структуры и фазовых переходов сложных нанокристаллических оксидов железа в широком диапазоне давлений и температур

***Н. М. Белозерова*[1,2], *С. Е. Кичанов*[2], *А. В. Руткаускас*[2], *О. Н. Лис*[2], *Д. П. Козленко*[2], *Е. В. Лукин*[2], *Б. Н. Савенко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

Изучение ферритов со структурой шпинели имеет большое значение в связи с большим разнообразием их структурных и магнитных свойств, интересных с точки зрения фундаментальных и прикладных исследований. В частности, в этих соединениях могут реализовываться скошенные состояния антиферромагнетика, ферримагнетика, спинового стекла [1].

Значительная намагниченность насыщения, относительно высокое электрическое сопротивление, низкие электрические потери и хорошая химическая стабильность делают ферриты шпинельного типа важными для широкого спектра технологических применений в качестве сердечников трансформаторов, радиочастотных цепей, стержневых антенн, устройств хранения данных [2,3]. Более того, такие ферриты могут быть полезны в биомедицинских применениях: как эффективный нагревательный агент для лечения раковых тканей посредством магнитной гипертермии, как биомаркеры для МРТ-диагностики и в магнитных системах доставки лекарств [3, 4].

Широкий спектр магнитных свойств ферритов шпинели определяется особенностями распределения ионов железа между различными кристаллографическими позициями в кристаллических структурах шпинельного типа [2,4]. Одной из важных частей перспективных исследований ферритов типа шпинели является синтез сложных ферритов с контролируемым перераспределением ионов железа между позициями A и B, приводящий к получению настраиваемых магнитных систем [3,4]. Понимание взаимосвязи между структурными свойствами и магнитным порядком ферритной шпинели может быть дано исследованиями модификаций магнитной структуры при изменении структурных параметров под действием давления [4].

В настоящей работе феррит со структурой шпинели $Zn_{0.34}Fe_{2.53}\square_{0.13}O_4$ (□-представляет собой вакансию) был выбран для проведения исследований по рентгеновской и нейтронной дифракции при высоком давлении, в широком диапазоне температур. Эксперименты по нейтронной дифракции в широком диапазоне температур проводились на дифрактометре ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ). Рентгеновские дифракционные данные были получены на специализированном дифрактометре Xeuss 3.0 (Xenocs SAS, Франция) с использованием ячейки высокого давления с алмазными наковальнями.

Изучено распределение катионов железа в кристаллографических позициях A и B. Представлены рассчитанные параметры решетки, межатомные расстояния и углы, а также магнитные моменты в зависимости от температуры. Обнаружен фазовый переход от исходной фазы с кубической структурой (Fd-3m) к фазе высокого давления с ромбической структурой (Pnam) в феррите $Zn_{0.34}Fe_{2.53}\square_{0.13}O_4$ при давлении выше 18 ГПа. Обсуждаются структурные механизмы магнитного перехода в ферритах со структурой шпинели.

Работа поддержана грантом РНФ-БРФФИ № 24-42-10003.

Литература

1. *Ata-Allah S. S., Yehia M.* Transport properties and conduction mechanisms in $CuFe_2O_4$ and $Cu_{1-x}Zn_xGa_{0.3}Fe_{1.7}O_4$ compounds // Physica B: Condensed Matter. 2009. V. 404(16). P. 2382–2388.
2. *El Moussaoui H.* [et al.]. Cation distribution and magnetic interactions in Zn-substituted $Fe(Cu)Fe_2O_4$ ferrites // Journal of superconductivity and Novel Magnetism. 2012. V. 25. P. 2473–2480.
3. *Veverka M.* [et al.]. Distribution of cations in nanosize and bulk Co–Zn ferrites // Nanotechnology. 2012. V. 22(34): 345701.
4. *Kozlenko D. P.* [et al.]. Neutron diffraction study of the pressure and temperature dependence of the crystal and magnetic structures of $Zn_{0.3}Cu_{0.7}Fe_{1.5}Ga_{0.5}O_4$ polycrystalline ferrite // Journal of Magnetism and Magnetic Material. 2018. V. 449. P. 44–48.

УДК 537.622, 537.623, 538.958

Обратный эффект Фарадея в пленках феррит-гранатов в ближнем ИК-диапазоне

***Н. И. Грибова*[1,3], *А. Ю. Федоров*[1,3], *А. Е. Безменова*[2,3], *Д. М. Кричевский*[1,3], *В. Н. Бержанский*[4], *В. И. Белотелов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[3]Российский квантовый центр
[4]Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского

В методе «накачки-зондирования» возбуждение динамики намагниченности осуществлялось с помощью фемтосекундных лазерных импульсов накачки в тонких пленках феррит-гранатов. Взаимодействие электромагнитной волны с магнитооптическим веществом определяется локальным нагревом образца, магнитооптическими эффектами, свойствами материала, а также фотоиндуцированной магнитной анизотропией. Далее будет показано, что наблюдаемая динамика намагниченности определяется только магнитооптическими эффектами.

Свойства материала играют ключевую роль в описании магнитооптических эффектов, а именно дисперсионные соотношения диагональных и недиагональных элементов тензоров диэлектрической [1, 2] и магнитной проницаемости [3], $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{\mu}$ соответственно.

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & -i\varepsilon_{xy} & 0 \\ i\varepsilon_{yx} & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & -i\mu_{xy} & 0 \\ i\mu_{yx} & \mu_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}.$$

Прямой и обратный эффекты Фарадея определяются электро-дипольными и магнито-дипольными переходами, связанными с тетраэдрическими и октаэдрическими участками кристаллической решетки железа в магнитооптическом материале. В ультрафиолетовом и видимом диапазонах преобладают электро-дипольные переходы, а в ближнем и инфракрасном диапазоне магнито-дипольные. Соответственно, в данной работе вклад, обусловленный последним типом переходов, является константой в прямом эффекте Фарадея, так как резонанс находится в ИК-диапазоне. Тензор магнитной проницаемости представляется в виде:

$$\hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu & -ia/w & 0 \\ ia/w & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{pmatrix},$$

где a является константой.

Тогда угол Фарадея и эффективное поле ОЭФ можно представить в виде суммы:

$$\theta_F = \theta_{ED} + \theta_{MD}, H_{IFE} = H_{ED} + H_{MD}.$$

Эффективное поле ОЭФ [4] зависит напрямую от угла Фарадея по следующим формулам.

$$\theta_F = \frac{\pi l}{\lambda\sqrt{\varepsilon_{xx}\mu_{xx}}}\left(\varepsilon_{xy}(\lambda) + \mu_{xy}(\lambda)\right),$$

$$H_{IFE} = \frac{E_0^2}{4\pi M}\left(\varepsilon_{xy}(\lambda) + \mu_{xy}(\lambda)\right) = \frac{E_0^2}{4\pi^2 M}\frac{\lambda\sqrt{\varepsilon_{xx}\mu_{xx}}}{l}\theta_F,$$

где вклад вносят как диагональные, так и недиагональные части тензоров.

Эксперименты были проведены на тонкой пленке редкоземельного феррита-граната толщиной 2120нм ($Bi_{1.1}Y_{0.9}Lu_{1.0}Fe_{4.5}Sc_{0.5}O_{12}$), выращенного методом жидкофазной эпитаксии на подложке гадолиний-галлиевого граната (ГГГ). Такой выбор образца обусловлен наличием висмута [5] для увеличения угла Фарадея.

Динамика намагниченности возбуждалась фемтосекундными лазерными импульсами накачки длительностью 250фс. Импульсы накачки имели круговую поляризацию, длина волны накачки изменялась от 1300нм до 1950нм. Прецессия намагниченности во внешнем магнитном поле наблюдалась с помощью линейно поляризованного лазерного луча зондирования с длиной волны 525 нм. В результате прецессии намагниченности [6] изменяется проекция намагниченности на волновой вектор зондирующего им-

пульса, что регистрируется изменением угла Фарадея. В плоскости образца прикладывалось внешнее постоянное магнитное поле 180мТл.

На рис. 1 представлены изменения угла Фарадея от времени при разных длинах волн импульсов накачки. Все данные ортонормированы на плотность энергии накачки при постоянной плотности энергии зондирования.

Аппроксимация спектров, полученная нахождением параметров электро-дипольных и магнито-дипольных переходов, пропускания и угла Фарадея для данного образца представлена на рис. 2.

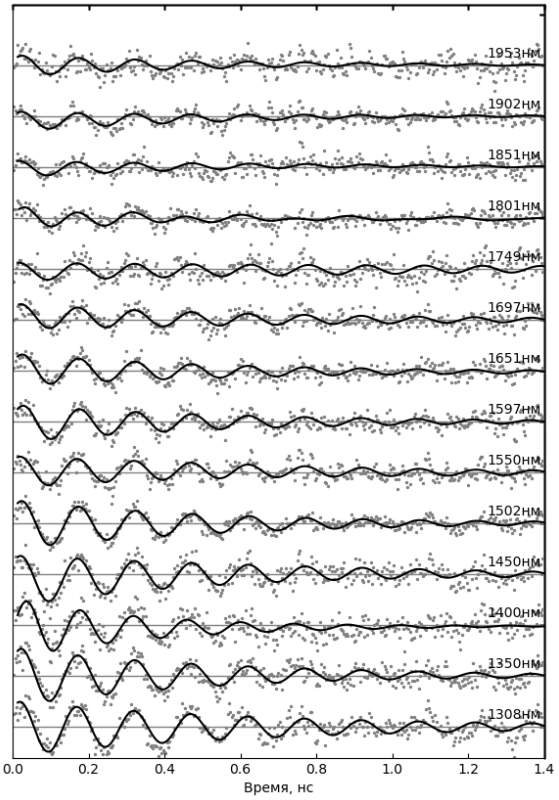


Рис. 1. Прецессия намагниченности при возбуждении импульсами накачки в диапазоне от 1300 до 1950 нм, нормированная на плотность. Внешнее магнитное поле 180 мТл. Импульс накачки воздействует на образец в момент времени $t = 0$

Подобранные параметры определяют диагональные и недиагональные элементы тензоров, получая хорошую сходимость с теоретическим описанием и экспериментом.

Наблюдаемые эффекты являются магнитооптическими, не определяются локальным нагревом образца и фотоиндуцированной анизотропией.

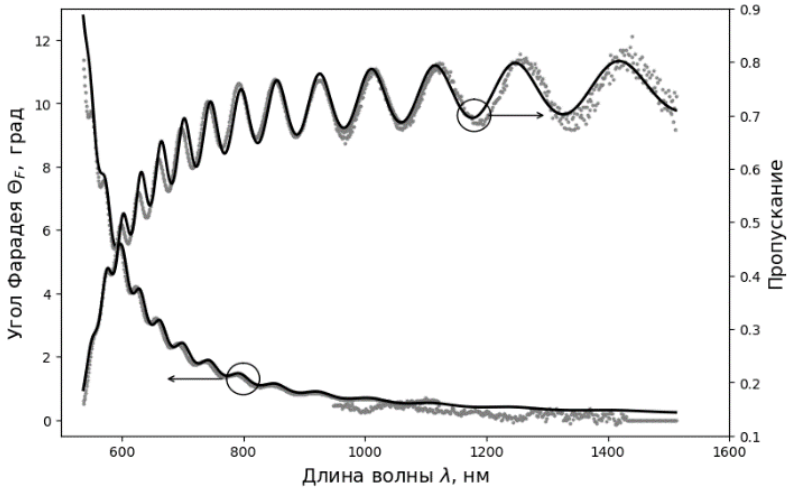


Рис. 2. Спектры коэффициента оптического пропускания и угла Фарадея исследуемого образца. Угол Фарадея измерен при приложении внешнего магнитного поля величиной 250мТл по нормали к образцу

Прямой и обратных эффекты Фарадея определяются электро-дипольными и магнито-дипольными вкладами, причем в ИК области вклад от магнито-дипольных переходов больше. В дальнейших исследованиях будут получены результаты в большем диапазоне длин волн импульсов накачки, а также проведены исследования на других образцах.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-62-10024.

Литература

1. *Allen G. A., Dionne G. F.* Application of permittivity tensor for accurate interpretation of magneto-optical spectra // Journal of applied physics. 1993. V. 73(10). P. 6130–6132.
2. *Dzibrou D. O., Grishin A. M.* Fitting transmission and Faraday rotation spectra of [Bi3Fe5O12/Sm3Ga5O12] m magneto-optical photonic crystals // Journal of Applied Physics. 2009. V. 106(4): 043901.
3. *Krinchik G. S., Chetkin M. V.* Transparent ferromagnets // Soviet physics uspekhi. 1969. V. 12(3). P. 307–320.
4. *Pitaevskii L. P.* Electric forces in a transparent dispersive medium // Sov. Phys. JETP. 1961. V. 12(5). P. 1008–1013.
5. *Wittekoek S.* [et al]. Magneto-optic spectra and the dielectric tensor elements of bismuth-substituted iron garnets at photon energies between 2.2–5.2 eV // Physical review B. 1975. V. 12(7). P. 2777-2789.
6. *Kimel A. V.* [et al]. Ultrafast non-thermal control of magnetization by instantaneous photomagnetic pulses // Nature. 2005. V. 435(7042). P. 655–657.

УДК 533.951, 535.393, 538.958

Интерференция E-волн от пленок из слабо проводящего и прозрачного веществ

***Н. В. Зверев*[1], *А. Х. Абдуев*[1,2], *А. А. Зотов*[1,3]**

[1]Государственный университет просвещения
[2]Российский университет дружбы народов
[3]Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Современное развитие тонкопленочных технологий, ориентированных на создание и эксплуатацию различных электронных и оптических устройств, имеет большую потребность в использовании материалов из слабых проводников [1]. В работе [2] был теоретически изучен одномерный фотонный кристалл, состоящий из нескольких чередующихся тонких слоев слабо проводящего и прозрачного веществ. Такие устройства удобны для создания частотных областей отражения и прохождения излучения вследствие интерференции отраженных от слоев и проходящих через слои волн, хотя они и сложны в изготовлении.

Рассмотрим более простые структуры, использующие интерференцию волн. Такими структурами являются системы из двух параллельных пленок: одна из слабого проводника, а другая — из прозрачного диэлектрика. Пусть каждая из этих пленок имеет одинаковую толщину d и находится между двумя прозрачными средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2. Считаем также, что прозрачная пленка сделана из вещества с проницаемостью ε_3. Пусть на эти пленки со стороны среды с ε_1 под углом θ падает монохроматическая E-волна с частотой ω. Тогда энергетические коэффициенты отражения и прохождения волн в результате интерференции определяются формулами [3, 4]:

$$R_{itf} = \frac{1}{4}|r_1 + r_2|^2, \qquad T_{itf} = \frac{1}{4}|t_1 + t_2|^2 \, Re\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}\frac{\cos\theta'}{\cos\theta}\right). \tag{1}$$

Здесь θ' — угол преломления волны в среду с ε_2, r_1 и r_2 — коэффициенты отражения волны от слабо проводящей и прозрачной пленки, t_1 и t_2 — коэффициенты прохождения волны через эти пленки:

$$r_j = |r_j|e^{i\varphi_{rj}}, \qquad t_j = |t_j|e^{i\varphi_{tj}} \qquad (j = 1,\ 2). \tag{2}$$

В данной формуле ϕ_{rj} и ϕ_{tj} — фазы волны после отражения от пленки и после прохождения через пленку. Коэффициенты r_1 и t_1 определяются продольной и поперечной диэлектрическими проницаемостями $\varepsilon_l(\omega,k)$ и $\varepsilon_{tr}(\omega,k)$ плазмы электронов проводимости слабого проводника, где k — волновое число. А r_2 и t_2 зависят от проницаемости ε_3 прозрачного вещества.

Нами взяты для исследований диэлектрические проницаемости квантовой электронной плазмы с постоянной частотой столкновений [5, 6]. Они, кроме зависимости от ω и k, зависят еще от плазменной частоты ω_p, от частоты столкновений электронов проводимости в плазме ν, от эффективной массы электронов проводимости m_e, и от температуры электронов плазмы T. Результаты, полученные для этих

проницаемостей, сравниваются с данными, найденными для проницаемостей классического электронного газа [4].

Слабо проводящим веществом, взятым нами для исследований, является графит [2, 7]. Для графита по данным [7] вычислены эффективные значения $\omega_p = 2.54 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$ и ν. В качестве прозрачных сред, окружающих пленки, нами взяты воздух или вакуум с $\varepsilon_1 = 1$ и кварц с $\varepsilon_2 = 2$. А веществом прозрачной пленки является гель с проницаемостью $\varepsilon_3 = 1.6$.

Нами выполнены численные расчеты коэффициентов (1) и косинусов $\cos\Delta\phi_R$ и $\cos\Delta\phi_T$, где разности фаз волн $\Delta\phi_R = \phi_{r1} - \phi_{r2}$ и $\Delta\phi_T = \phi_{t1} - \phi_{t2}$ находят с учетом (2). Расчеты показывают, что для толщин пленок $d << c/\omega_p$ (толщина скин-слоя графита) и $d >> \upsilon_T/\omega_p$ (радиус Дебая графита), где c и υ_T — скорость света и тепловая скорость электронов проводимости, наблюдается резонансное поведение данных величин при частотах Е-волны ω, немного превосходящих плазменную частоту ω_p (рис. 1). Такое поведение обусловлено влиянием продольных плазменных колебаний между поверхностями в графитовой пленке [2 — 4]. Также имеет место зависимость резонансных частот от температуры T, и с ростом температуры эти частоты возрастают (рис.2).

Данные результаты необходимо применять при создании и эксплуатации оптических устройств, использующих интерференцию излучения от слабо проводящей и прозрачной пленок.

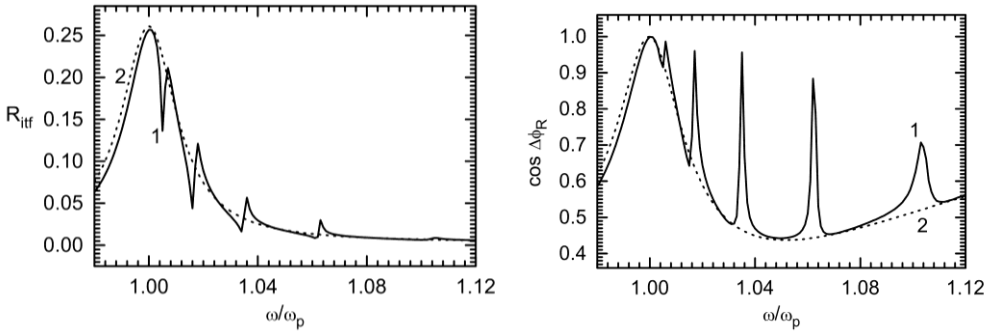


Рис. 1. Зависимость R_{itf} (слева) и $\cos\Delta\phi_R$ (справа) от частоты ω: 1 — квантовая электронная плазма, 2 — классический электронный газ. Значения $\theta = 60°$, $T = 294$ К, $d = 40$ нм, $\omega_p = 2.54 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$

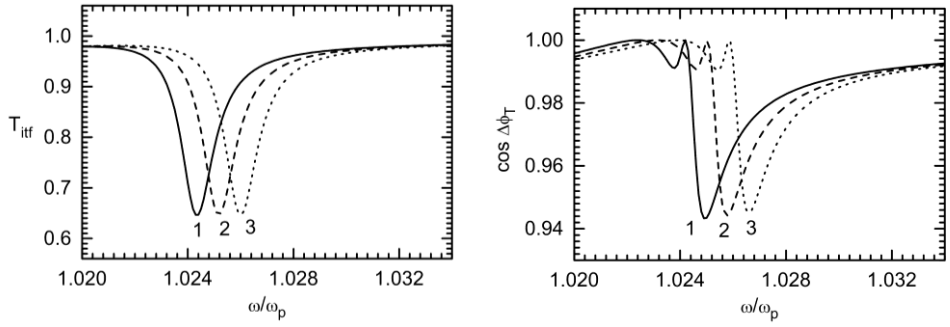


Рис. 2. Зависимость T_{itf} (слева) и $\cos\Delta\phi_T$ (справа) от частоты ω: 1 — $T = 284$ К, 2 — $T = 294$ К, 3 — $T = 304$ К. Значения $\theta = 45°$, $d = 20$ нм, $\omega_p = 2.54 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$

Авторы благодарны проф. А. А. Юшканову и проф. В. В. Беляеву за полезные замечания и предложения. Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 22-19-00157.

Литература

1. *Yin S.* [et al.] Terahertz nonreciprocal and functionality-switchable devices based on dielectric multilayers integrated with graphene and VO_2 // Opt. Lett. 2022. V. 47. P. 678–681.
2. *Belyaev V.* [et al.] E-Wave Interaction with the One-Dimensional Photonic Crystal with Weak Conductive and Transparent Materials // Coatings. 2023. V. 13 (712). P. 1–10. DOI: 10.3390/ coatings13040712.
3. *Зверев Н. В., Юшканов А. А.* Электронная плазма и интерференция излучения от металлической и диэлектрической пленок // Вестник МГОУ. Серия: Физика-Математика. 2019. № 1. С. 46–56.
4. *Jones W. E., Kliewer K. L., Fuchs R.* Nonlocal Theory of the Optical Properties of Thin Metallic Films // Phys. Rev. 1969. V. 178(3). P. 1201–1203.
5. *Латышев А. В., Юшканов А. А.* Поперечная электрическая проводимость квантовой столкновительной плазмы в подходе Мермина // ТМФ. 2013. Т. 175. № 1. С. 132–143.

6. *Латышев А. В., Юшканов А. А.* Продольная электрическая проводимость в квантовой плазме с переменной частотой столкновений в рамках подхода Мермина // ТМФ. 2014. Т. 178. № 1. С. 147–160.
7. *Бабичев А. П.* [и др.] Физические величины: Справочник / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991.

УДК 535.21

Генерация узкополосного микроволнового сигнала в лазере с внешним резонатором в режиме затягивания частоты на дополнительный высокодобротный микрорезонатор

***Н. А. Каридов*[1,3], *А. Е. Шитиков*[3], *Д. А. Чермошенцев*[3], *И. А. Биленко*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[3]Российский квантовый центр

Генерация узкополосного сигнала в микроволновом частотном диапазоне представляет большой интерес во многих технологических сферах, таких как оптическая передача сигналов [1], оптическая обработка сигналов, сенсоры [2], радары, спутниковая и космическая связь [3].

Предложено большое количество различных способов генерации сигнала в микроволновой частотной области, одним из которых является перевод лазера с внешним резонатором в контролируемый стабильный многочастотный режим [4].

Затягивание [5] лазера на высокодобротный резонатор представляет из себя методику подавления фазовых шумов лазерного излучения и сужения линии излучения благодаря созданию селективной обратной связи, обеспечиваемой резонатором.

В данной работе мы показываем, что перевод лазера с внешним резонатором в стабильный многочастотный режим и его затягивание на высокодобротный резонатор обеспечивают генерацию узкополосного сигнала в микроволновом частотном диапазоне.

Лазер, используемый в эксперименте, собран по схеме Литтрова (рис.1, а), в которой внешний резонатор образован передней стенкой лазерного диода и дифракционной решеткой. Такая схема позволяет перестраивать длину волны излучения лазера благодаря изменению положения дифракционной решетки и обеспечивает сужение линии излучения.

Схема экспериментальной установки для наблюдения микроволновых осцилляций и затягивания лазера на внешний кристаллический резонатор приведена на рис. 1*б*

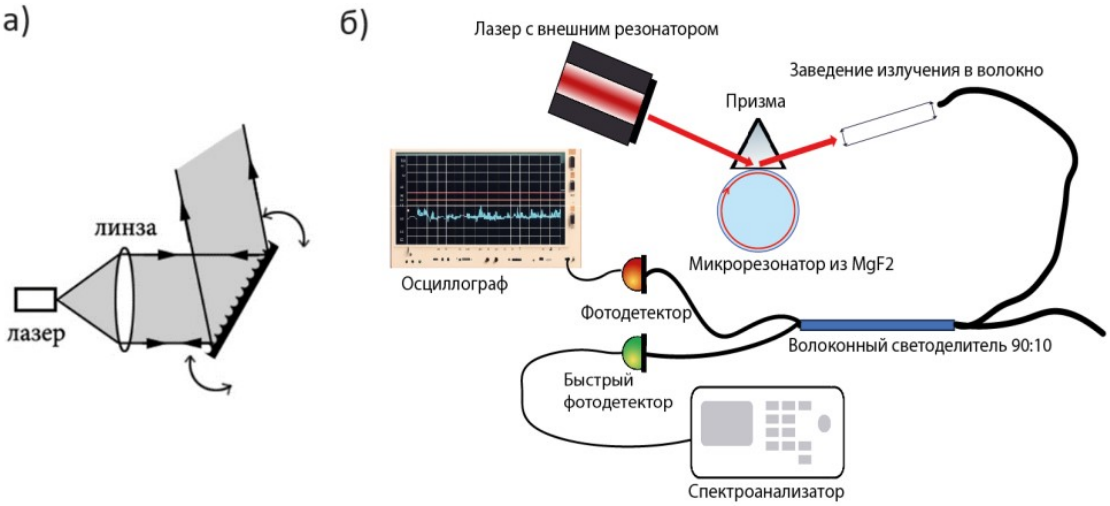


Рис. 2. Лазер с внешним резонатором в схеме Литтрова (*а*) и схема экспериментальной установки по генерации микроволнового излучения и затягивания лазера на внешний резонатор (*б*)

Для перевода лазера в многочастотный режим необходимо подобрать определенные значение тока накачки лазерного диода и положение дифракционной решетки, обеспечивающие многочастотную генерацию.

При определенных значениях тока и положения дифракционной решетки на анализаторе радиочастотного спектра можно видеть сигналы биения линий лазера на нескольких эквидистантных частотах,

равных приблизительно 8.3 ГГц, 16.6 ГГц, 24.9 ГГц (рис. 2). Эти частоты определяются структурой внешнего резонатора лазера.

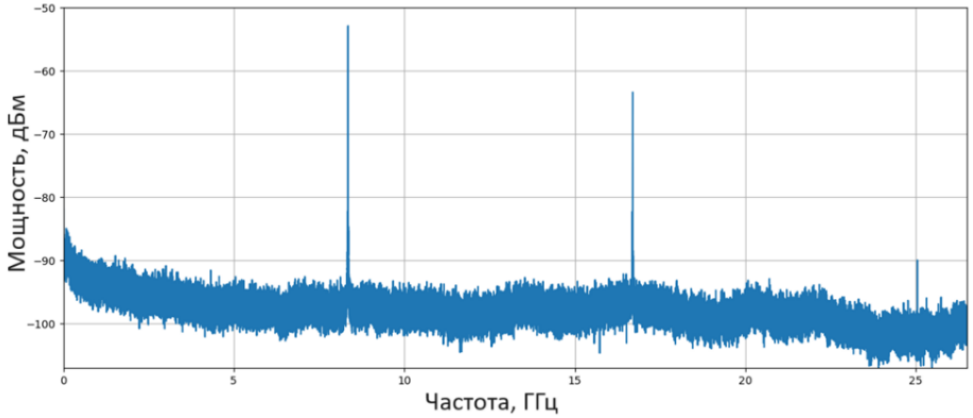


Рис. 3. Спектр биений линий лазера с внешним резонатором

В дальнейшем в эксперименте исследовалась линия на частоте 8.3 ГГц. Ширина спектра этой линии в свободном режиме (без затягивания на кристаллический резонатор) составляет несколько килогерц (рис. 3*а*).

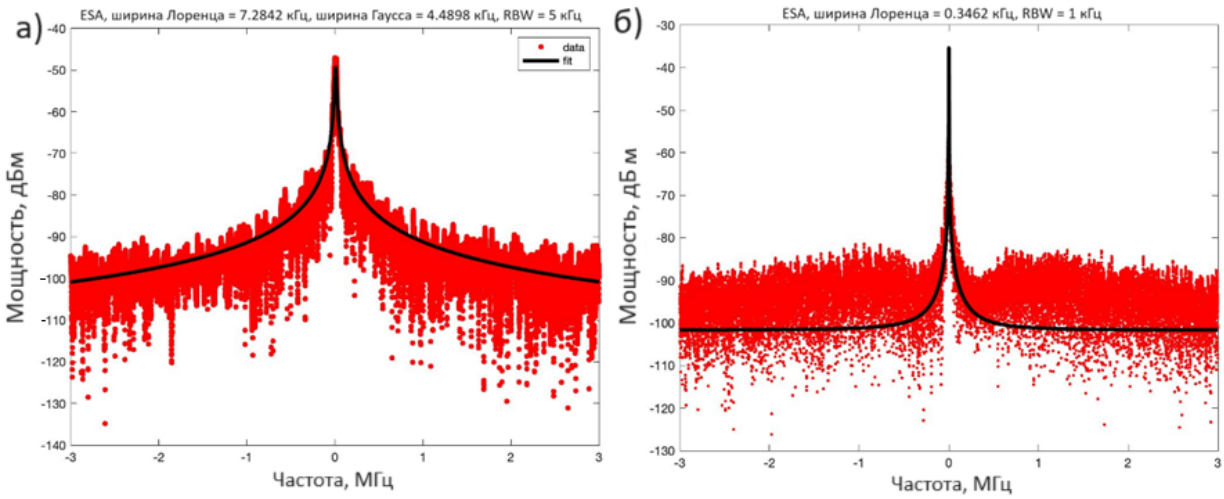


Рис. 4. Спектр линии биений лазера с внешним резонатором на частоте 8.3 ГГц в свободном режиме (*а*) и в режиме затягивания (*б*)

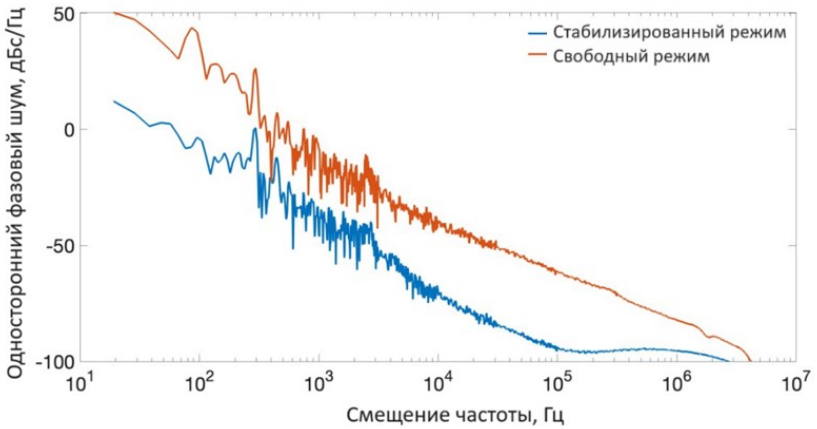


Рис. 5. Спектральная плотность фазовых шумов микроволнового сигнала при лазере, работающем в свободном режиме (оранжевый сигнал) и в режиме затягивания (синий сигнал)

Нам удалось экспериментально показать, что при затягивании одной из частот лазера на дополнительный кристаллический резонатор из фторида магния с добротностью $5*10^8$ и межмодовым

расстоянием 22 ГГц при удачно подобранной фазе обратной волны спектр микроволнового сигнала сужается приблизительно на 2 порядка (рис. 3*б*), до нескольких сотен герц, а его фазовые шумы существенно подавляются (рис. 4). Это в том числе означает, что при затягивании одной из частот лазера сужаются все его частоты.

Таким образом, в данной работе показано, что лазер с внешним резонатором, переведенный в многочастотный режим и затянутый на высокодобротный резонатор, может служить источником узкополосного (несколько сотен герц) излучения в микроволновом диапазоне, что крайне востребовано во многих практических приложениях.

Литература

1. *Johansson L. A., Seeds A. J.* Generation and transmission of millimeter-wave data-modulated optical signals using an optical injection phase-lock loop // J. Lightwave Technol. 2003. V. 21(2). P. 511–520.
2. *Chew S. X.* [et al.]. Optoelectronic oscillator-based sensor using an on-chip sensing probe // IEEE Photonics J. 2017. V. 9(2): 5500809. DOI: 10.1109/jphot.2017.2671461.
3. *Gliese U., Christensen E. L., Stubkjaer K. E.* Laser linewidth requirements and improvements for coherent optical beam forming networks in satellites // J. Lightwave Technol. 1991. V. 9(6). P. 779–790. DOI: 10.1109/50.81982.
4. *Zorabedian P.* Axial-mode instability in tunable external-cavity semiconductor lasers // IEEE J. Quantum Electron. 1994. V. 30(7). P. 1542–1552. DOI: 10.1109/3.299486.
5. *Kondratiev N. M.* [et al.]. Self-injection locking of a laser diode to a high-Q WGM microresonator // Opt. Express. 2017. V. 25(23). P. 28167–28178. DOI: 10.1364/oe.25.028167.

УДК 535.544

Изучение оптических свойств ван-дер-ваальсовых материалов методом поляризационной микрорефлектометрии

Н. В. Пак, М. К. Татмышевский, А. С. Славич

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Нанофотоника — быстро развивающаяся область науки, в которой изучается множество интересных с оптической точки зрения материалов. В этом отношении исследования двумерных (2D) материалов, таких как графен, дихалькогениды переходных металлов, фосфорен и т. д., демонстрируют интригующие электронные и оптические свойства [1]. Кристаллы Ван-дер-Ваальса, самые распространенные 2D материалы, обладают слоистой структурой, вызванной разной природой межатомных связей: в плоскости слоев атомы связаны ковалентными связями, в то время как сами слои — ван-дер-ваальсовыми силами [2–3]. Подобное строение кристаллов обычно приводит к сильной оптической анизотропии. Наряду с этим использование анизотропии в плоскости слоев в проектировании будущих устройств нанофотоники имеет огромный потенциал [4–6]. По этой причине ван-дер-ваальсовы кристаллы с анизотропными оптическими свойствами внутри слоев представляют интерес и требуют детального исследования. Однако изучение оптических свойств 2D материалов затруднено малым размером изготавливаемых плоских микрокристаллов и высокой стоимостью оборудования, способного работать на таком малом масштабе.

В данной работе представлен метод исследования и верификации оптических констант ван-дер-ваальсовых материалов. В рамках исследования создана оптическая установка на основе тринокулярного микроскопа, работающего в режиме отражения, на примере опубликованной работы [7], модифицированная двумя поляризаторами. Первый поляризатор помещен перед источником света, а второй — перед детектирующей системой. По результатам исследования была отработана методика измерения поляризационных спектров отражения ван-дер-ваальсовых микрокристаллов с латеральными размерами меньше 50 мкм. Анализ спектров отражения в совокупности с измеренной толщиной образцов посредством атомно-силовой микроскопии, позволяет моделировать оптические константы изучаемых материалов и верифицировать данные, полученные другими экспериментальными методами.

Литература

1. *Jahani S., Jacob Z.* All-dielectric metamaterials // Nat. Nanotechnol. 2016. V. 11. P. 23–36.
2. *Wei M.* [et al.]. Layer-dependent optical and dielectric properties of centimeter-scale $PdSe_2$ films grown by chemical vapor deposition // npj 2D Mater. Appl. 2022. V. 6: 1.

3. *Tan D.* [et al.]. Anisotropic optical and electronic properties of two-dimensional layered germanium sulfide // Nano Research. 2017. V. 10(2). P. 546-555.
4. *Ermolaev G. A.* [et al.]. Wandering principal optical axes in van der Waals triclinic materials // Nat. Commun. 2024. V. 15: 1552.
5. *Slavich A. S.* [et al.]. Exploring van der Waals materials with high anisotropy: geometrical and optical approaches // Light Sci. Appl. 2024. V. 13: 68.
6. *Zhong J.* [et al.]. High-performance polarization-sensitive photodetector based on a few-layered $PdSe_2$ nanosheet // Nano Res. 2020. V. 13. P.1780–1786.
7. *Frisenda R.* [et al.]. Micro-reflectance and transmittance spectroscopy: a versatile and powerful tool to characterize 2D materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50: 074002.

УДК 538.958

Признаки pancake-bonding в гидратированных эумеланинах

П. А. Абрамов, К. А. Мотовилов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Эумеланины, пигменты кожи человека, представляющие собой различные производные полиин-долхинона, обладают уникальным сочетанием физических и химических свойств. Материал уже нашел многочисленные применения в области биоэлектроники.

В настоящее время материал считается неупорядоченной олигомерной системой. Однако в рентгеновской дифракции меланин демонстрирует пик рассеяния, соответствующий ~3.4–3.9 Å в вакууме, ассоциируемый с расстоянием π–π-стекинга [1, 2]. Широко известно, что гидратация эумеланинов существенно влияет как на молекулярные [3], структурные [4], магнитные [5], и электрические свойства [6]. Однако анализа изменения структурных параметров меланинов от содержания воды до сих пор не произведено. В данной работе мы представляем первое исследование рентгеновской дифракции чистого и допированного ионами Cu2+ (0.46 ммол/г) синтетических эумеланинов, и природного эумеланина из чернил каракатицы Sepia Officinalis при контролируемых величинах гидратации.

Эксперимент проводился на дифрактометрах X'Astra (МФТИ, Долгопрудный) в геометрии отражения и на Xenocs Xeuss 3.0 (ОИЯИ, Дубна) в геометрии пропускания. В первом случае в специально изготовленной герметичной кювете образец чистого синтетического эумеланина выдерживался на протяжении суток в атмосфере с нужным содержанием воды. Непосредственно перед экспериментом крышка кюветы снималась, измерения проводились с небольшим накоплением, так чтобы десорбция воды была пренебрежимо мала. Во втором случае, в дифрактометре Xenocs, все образцы помещались в измерительную камеру в запаянных капиллярах, предварительно выдержанных в нужной атмосфере. Количество воды, поглощенной образцами, оценивалось в соответствии с опубликованными изотермами адсорбции [7–10]. Полученные результаты (Рис.1) интерпретированы как наблюдаемый эффект так называемого pancake-bonding [11].

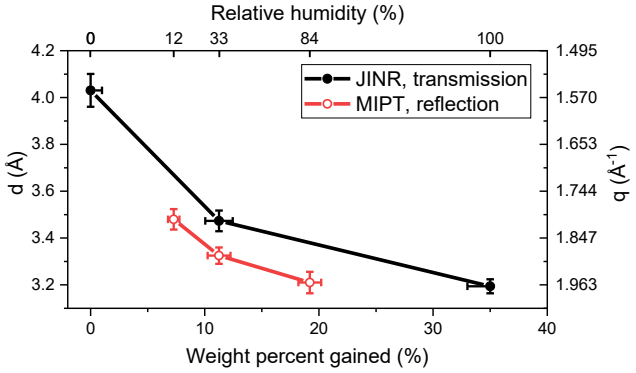


Рис. 1. Изменение положение пика рентгеновского рассеяния чистого синтетического эумеланина от гидратации. Данные соответствуют длине π-стека, в геометрии пропускания (черные закрашенные точки) и отражения (красные пустые точки)

До сих пор феноменология pancake-bonding была в основном ограничена кристаллизуемыми и легко моделируемыми искусственными системами. Однако мы считаем, что данная концепция может

быть применена к природным неупорядоченным системам, содержащим хиноидные фрагменты, для объяснения их физических свойств.

Авторы выражают благодарность А. Б. Мостерту за синтез материалов для исследования.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-73-10154.

Литература

1. *Watt A. A. R., Bothma J. P., Meredith P.* The supramolecular structure of melanin // Soft Matter. 2009. V. 5(19). P. 3754–3760.
2. *Cheng J., Moss S. C., Eisner M.* X-Ray Characterization of Melanins—II // Pigment Cell Res. 1994. V. 7(4). P. 263–273.
3. *Bedran Z. V.* [et al.]. Water-Activated Semiquinone Formation and Carboxylic Acid Dissociation in Melanin Revealed by Infrared Spectroscopy // Polymers. 2021. V. 13(24): 4403.
4. *Clulow A.* [et al.]. The structural impact of water sorption on device-quality melanin thin films // Soft Matter. 2017. V. 13. P. 3954–3965.
5. *Mostert A. B.* [et al.]. Role of semiconductivity and ion transport in the electrical conduction of melanin // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2012. V. 109(23). P. 8943–8947.
6. *Abramov P. A.* [et al.]. The influence of copper ions on the transport and relaxation properties of hydrated eumelanin // Phys. Chem. Chem. Phys. 2023. V. 25(16). P. 11601–11612.
7. *Mostert A. B.* [et al.]. Gaseous Adsorption in Melanins: Hydrophilic Biomacromolecules with High Electrical Conductivities // Langmuir. 2010. V. 26(1). P. 412–416.
8. *Martinez-Gonzalez J. A.* [et al.]. Interfacial water morphology in hydrated melanin // Soft Matter. 2021. V. 17(34). P. 7940–7952.
9. *Powell M. R., Rosenberg B.* The nature of the charge carriers in solvated biomacromolecules // J. Bioenerg. 1970. V. 1(6). P. 493–509.
10. *Simonović B.* Termalna analiza melanina: dokt. disertacija. 1989.
11. *Abramov P. A*. [et al.]. Signatures of pancake bonding in hydrated eumelanin // Phys. Chem. Chem. Phys. 2023. V. 25(24). P. 16212–16216.

УДК 535.21

Исследование влияния гибридного анапольного состояния на взаимодействие цилиндрической наночастицы с линейно-поляризованным гауссовым пучком

***С. Р. Розенталь*[1], *Н. С. Бабич*[2], *Д. А. Кислов*[1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Университет ИТМО

В настоящее время большой интерес представляют нерассеивающие состояния наночастиц (иначе называемые гибридными анапольными состояниями) [1], которые характеризуются значительным снижением сечения рассеяния в сравнении с обычными состояниями. Условием возникновения анапольного состояния является деструктивная интерференция базовых мультипольных компонент поляризационных токов в частице и тороидальных поправок к ним [2]:

$$\mathbf{M}_{\text{car}} + \mathrm{i}\frac{\mathrm{k}}{\mathrm{c}}\mathbf{T}^{(\mathrm{M})} = 0, \qquad (1)$$

где $\mathbf{M}_{\text{car}}$ — мультипольный момент, $\mathbf{T}^{(\mathrm{M})}$ — соответствующая ему тороидальная поправка, k — волновое число, c — скорость света.

Целью данной работы являлось изучение влияния гибридного анапольного состояния (ГАС) на величину и направление оптических сил, действующих на цилиндрическую наночастицу кремния со стороны линейно-поляризованного, сфокусированного гауссова пучка (рис. 1). При взаимодействии света с частицей можно выделить 2 компоненты сил. Сила давления вызвана передачей импульса волны объекту и толкает его вдоль направления распространения света [3], а градиентная составляющая втягивает частицу в область максимальной интенсивности [4].

В рамках работы было выполнено численное моделирование в программном обеспечении COMSOL Multiphysics. На первом этапе были подобраны параметры частицы, позволяющие получить в ней анапольное состояние при длине волны излучения 1064 нм (соответствующей лазеру YAG:Nd^{3+}). Была применена методика мультипольной декомпозиции поляризационных токов для вычисления

сечения рассеяния частицы. С учетом вклада дипольных (**p, m**), квадрупольных (**Q^e, Q^m**) и октупольных (**O^e, O^m**) компонент, полное сечение рассеяния выражается формулой [5]:

$$C_{tot} = \frac{k^4}{6\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{E}_{inc}|^2}\left[\begin{array}{c}\sum_\alpha\left(|p_\alpha|^2+\left|\frac{m_\alpha}{c}\right|^2\right)+\frac{1}{120}\sum_{\alpha,\beta}\left(\left|kQ^e_{\alpha\beta}\right|^2+\left|k\frac{Q^m_{\alpha\beta}}{c}\right|^2\right)+\\ \frac{1}{315}\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\left(\left|k^2O^e_{\alpha\beta\gamma}\right|^2+\left|k^2\frac{O^m_{\alpha\beta\gamma}}{c}\right|^2\right)\end{array}\right] \quad (2)$$

где $\mathbf{E}_{inc}$ — напряженность падающего поля, k — волновое число излучения, суммирование ведется по компонентам $\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$.

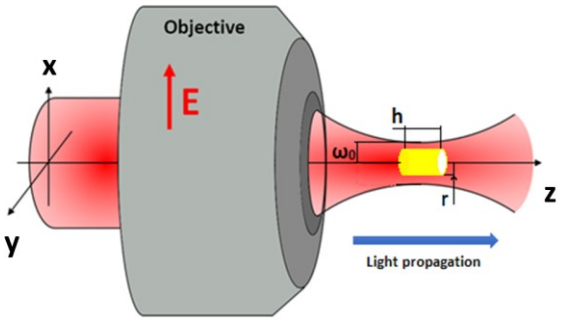


Рис. 1. Схема взаимодействия сфокусированного гауссова пучка с наночастицей

Удобно определить безразмерную величину, равную отношению сечения рассеяния к площади основания цилиндра: $\sigma_{tot} = \frac{C_{tot}}{\pi r^2}$, где r — радиус цилиндра. На рис. 2*а* представлена карта зависимости σ_{tot} от высоты наноцилиндра и длины волны излучения. Наиболее темная область карты соответствует минимуму рассеяния. Из рис. 2*б* видно, что у частицы с заданными параметрами (h = 535 нм, r = 190 нм) в узком диапазоне длин волн около 1064 нм минимума достигают одновременно 4 компоненты сечения расссеяния, соответствующие электрическим и магнитным диполям и квадруполям. Это означает, что частица действительно находится в гибридном анапольном состоянии.

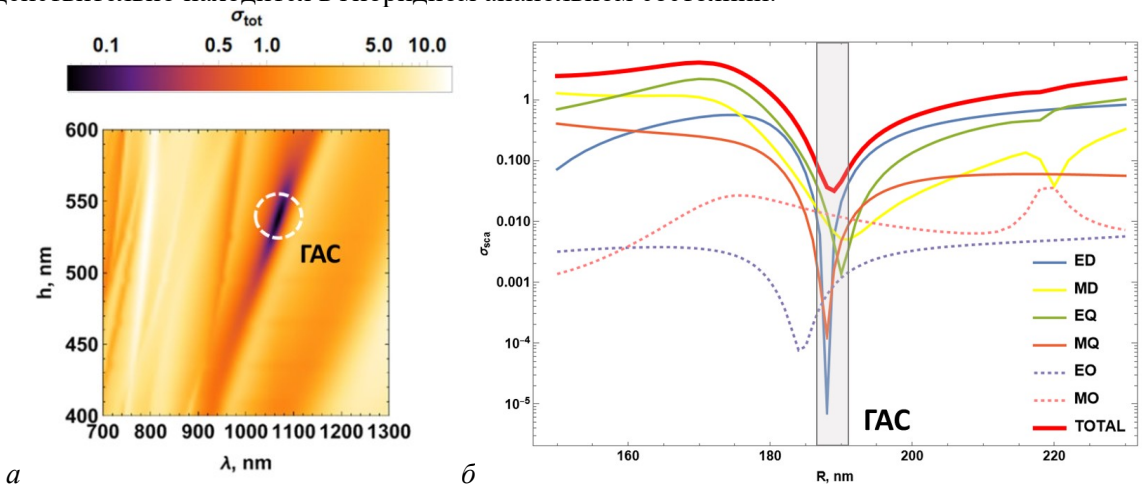


Рис. 2. Зависимость σ_{tot} от высоты частицы h и длины волны излучения λ

Также было отмечено, что в гибридном анапольном состоянии октупольные компоненты не имеют минимума. Поэтому, в отличие от рассеивающих состояний, в которых октупольные компоненты пренебрежимо малы по отношению к мультиполям низших порядков, в ГАС они вносят значительный вклад как в рассеяние, так и в оптические силы, действующие на частицу.

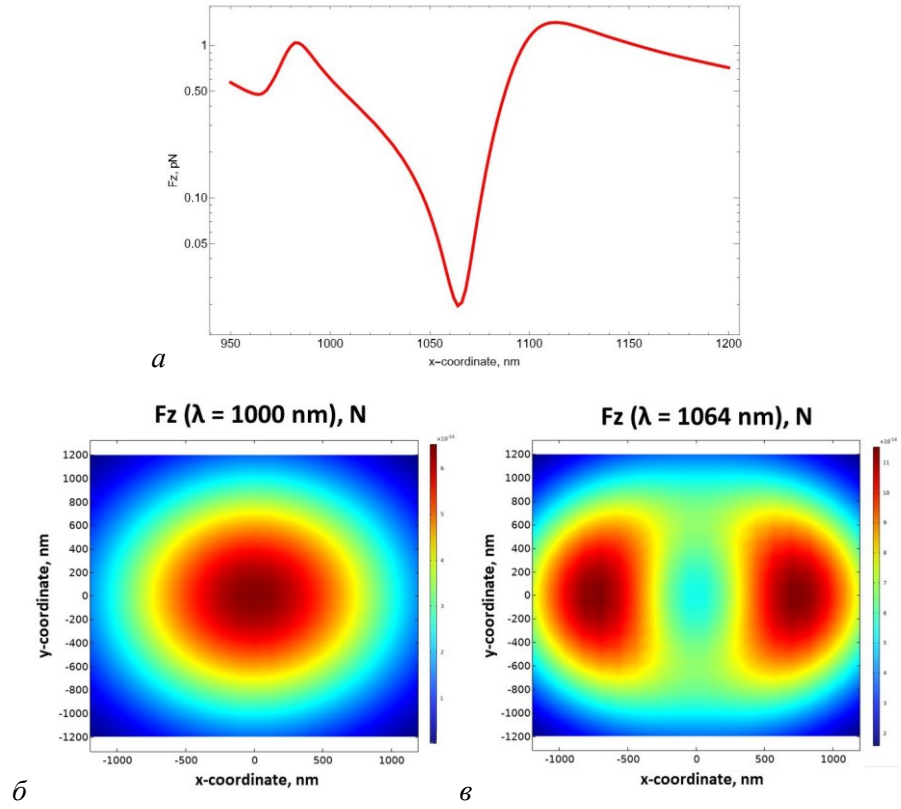
Усредненную по времени оптическую силу можно вычислить через тензор напряжений Максвелла [6]:

$$\langle\vec{\mathbf{M}}\rangle_t = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\left[\varepsilon_0\mathbf{E}\otimes\mathbf{E}+\mu_0\mathbf{H}\otimes\mathbf{H}-\frac{1}{2}(\varepsilon_0|\mathbf{E}|^2+\mu_0|\mathbf{H}|^2)\vec{\mathbf{I}}\right] \quad (4)$$

$$\langle\mathbf{F}\rangle_t = \int_S\langle\vec{\mathbf{M}}\rangle_t\cdot\mathbf{n}\,d\sigma \quad (3)$$

где $\vec{\mathbf{I}}$ — единичный тензор, ⊗ - диадное произведение, **E** и **H** — напряженности электрического и магнитного полей, dσ — элемент поверхности интегрирования S, окружающей частицу, **n** — единичный перпендикуляр к этой поверхности.

В случае смещения частицы в плоскости **xy**, перпендикулярной пучку, можно явно выделить 2 компоненты силы: давление, направленное вдоль оси **z** параллельно пучку, и градиентную силу, направленную вдоль направления смещения. Было показано, что если частица находится в перетяжке гауссова пучка, то при изменении длины волны сила давления изменяется пропорционально сечению рассеяния и достигает минимума в гибридном анапольном состоянии (рис. 3*а*). При смещении обыкновенной рассеивающей частицы сила давления меняется одинаково вдоль обеих осей (рис. 3*б*). В то время как у анапольной частицы появляется асимметрия изменения силы: смещение из перетяжки вдоль направления поляризации (ось **x**) приводит к «разрушению ГАС» и увеличению давления вплоть до значений, характерных для рассеивающего состояния, а при смещении вдоль оси **y** такого не наблюдается и давление увеличивается незначительно (рис. 3*в*). Явление разрушения ГАС обусловлено нелинейностью волнового фронта гауссова пучка.



а *б* *в*

Рис. 3. Зависимость силы давления от длины волны (*а*); зависимость силы давления от смещения в плоскости XY для рассеивающей частицы (*б*), для анапольной частицы (*в*)

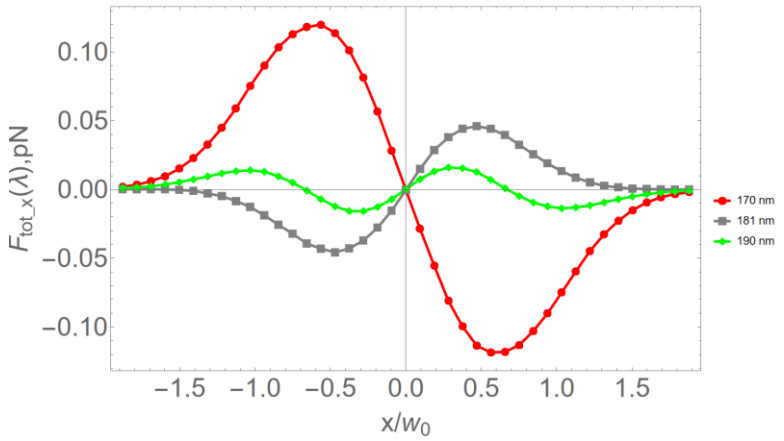


Рис. 4. Зависимость градиентной силы от смещения вдоль оси x при различных радиусах цилиндра (w_0 — радиус перетяжки гауссова пучка)

Помимо этого, была рассмотрена градиентная сила. В рассеивающем состоянии она всегда направлена так, что стремится втянуть частицу в область наибольшей интенсивности поля, то есть в перетяжку гауссова пучка, и плавно спадает при смещении из пучка (рис. 4, кривая r = 170 нм). Однако при приближении параметров системы к анапольным значениям градиентная сила меняет знак и начинает выталкивать частицу из перетяжки (рис. 4, кривая r = 180 нм). В анапольном состоянии наблюдаются оба этих эффекта одновременно: градиентная сила выталкивает частицу вблизи оси пучка и начинает притягивать ее на расстоянии $x \approx 0.7\, w_0$, где w_0 — радиус перетяжки. Таким образом, у градиентной силы, как и у силы давления, наблюдается «разрушение ГАС», которое приводит к явлению захвата частицы в точках, смещенных относительно области максимальной интенсивности пучка. Такие явления могут быть связаны с изменением направления поляризации частицы в анапольном состоянии и подлежат дальнейшему изучению.

Литература

1. *Luk'yanchuk B.* [et al.]. Hybrid anapole modes of high-index dielectric nanoparticles // Phys. Rev. A. 2017. V. 95(6): 063820.
2. *Gurvitz E. A.* [et al.]. The High-Order Toroidal Moments and Anapole States in All-Dielectric Photonics // Laser Photonics Rev. 2019. V. 13(5): 1800266.
3. *Ashkin A.* Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24(4). P. 156–159.
4. *Ashkin A., Dziedzic J. M., Chu S.* Observation of a single-beam gradient-force optical trap for dielectric particles in air // Opt. Lett. 1986. V. 22(11). P. 816–818.
5. *Alaee R.* [et al.]. An electromagnetic multipole expansion beyond the long-wavelength approximation // Opt. Commun. 2017. V. 407. P. 17–21.
6. *Novotny L., Hecht B.* Principles of nano-optics. — Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

УДК 535.421

Применение углеродных нанотрубок для изготовления дифракционных решеток терагерцевого диапазона

***А. В. Терентьев*[1], *И. В. Новиков*[2], *Н. И. Рагинов*[2], *Д. В. Красников*[2], *С. С. Жуков*[1], *К. В. Живетьев*[1], *Д. А. Илатовский*[2], *А. Элакшар*[2], *Э. М. Хабушев*[2], *А. К. Гребенко*[2], *С. А. Кузнецов*[3], *С. Д. Шандаков*[4], *Б. П. Горшунов*[1], *А. Г. Насибулин*[2]**

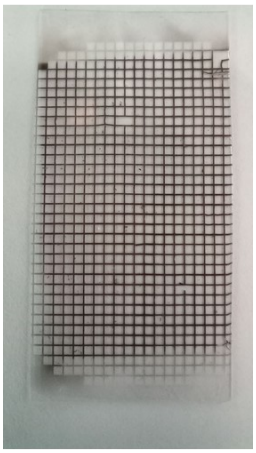
[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Новосибирский государственный университет
[4]Кемеровский государственный университет

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают уникальными структурными, электрическими и механическими свойствами, что делает их весьма привлекательными для применения в электронике, оптике и в других областях [1–2]. Использование тонких макро-размерных пленок ОУНТ продемонстрировало свою эффективность в различных оптических и электронных приложениях [3–4]. Например, система концентрических кругов из ОУНТ, нанесенная на эластомерную подложку, может быть использована в качестве терагерцевой (ТГц) линзы с перестраиваемым фокусным расстоянием [5]. На такую же подложку могут быть перенесены и другие двумерные структуры из ОУНТ, например, пленки или сетки, что открывает широкие возможности для гибких электронных и оптических приложений. Мы изготовили структуру (см. рис. 1) из ОУНТ на эластомере (Elastosil 2030, толщина 100 мкм) с целью ее использования в качестве дифракционной решетки с перестраиваемым периодом (от 1 мм до 1,5 мм).

Свойства приготовленной структуры были исследованы в интервале частот 3 — 65 $см^{-1}$ с применением импульсного ТГц спектрометра Menlo Tera K15. На рис. 2 представлен ТГц-спектр коэффициента пропускания свободновисящей (free-standing) сетки ОУНТ с периодом 1 мм. Отчетливо видны дифракционные пики 1-го, 2-го и 3-го порядков (аномалии Вуда [6]), которые соответствуют появлению новых пространственных гармоник на длинах волн $\lambda = d/m$ (m=1, 2, ...).

Применения таких решеток ОУНТ не ограничены только ТГц частотами. Мы полагаем, что на более низких частотах (например, в СВЧ-диапазоне) сетки такого типа могут эффективно использоваться для экранирования электромагнитных помех.

Работа [7] выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-72-20050.



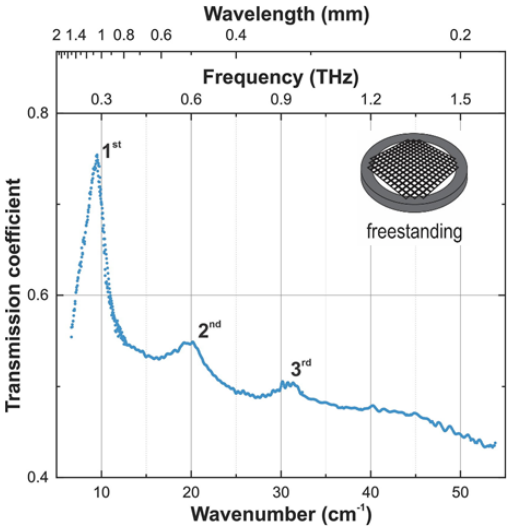


Рис. 1. Фотография типичной сетки из ОУНТ с периодом 1 мм и шириной полос 0,1 мм, перенесенной на эластомер Elastosil 2030 (толщина 100 мкм), на которой были выполнены терагерцевые эксперименты

Рис. 2. Терагерцевый спектр коэффициента пропускания свободновисящей (free-standing) сетки из ОУНТ с периодом 1 мм и шириной полос 0,1 мм (схематическое изображение на вставке). Отчетливо видны дифракционные пики 1-го, 2-го и 3-го порядков.Терагерцевые спектры пропускания аналогичной сетки из ОУНТ, нанесенной на эластомер, показаны на рис. 3. Здесь представлены спектры для сетки, которая подвергалась циклическому растяжению (до 50% деформации) с одновременным измерением ее коэффициента пропускания для двух поляризаций падающего ТГц излучения: для вектора **E** излучения, параллельного (*a*) и перпендикулярного (*b*) направлению растяжения. В обоих случаях дифракционные пики выражены не так четко, как в случае свободновисящей сетки (рис. 2), что означает, что слой эластомера ухудшает условия для возникновения добротных дифракционных гармоник, например, за счет большего количества вторичных гармоник, возникающих в ближней зоне из-за диэлектрического (эластомерного) слоя. Частотные положения дифракционных максимумов и минимумов выделены на рис. 3 заполненными треугольниками. Видны периодические сдвиги положений экстремумов, соответствующие увеличению и уменьшению периода сетки относительно направления растяжения. Обратная картина наблюдается для поляризации излучения с вектором **E**, перпендикулярным направлению растяжения, что связано с поперечным сжатием эластомера и соответствующим уменьшением периода сетки

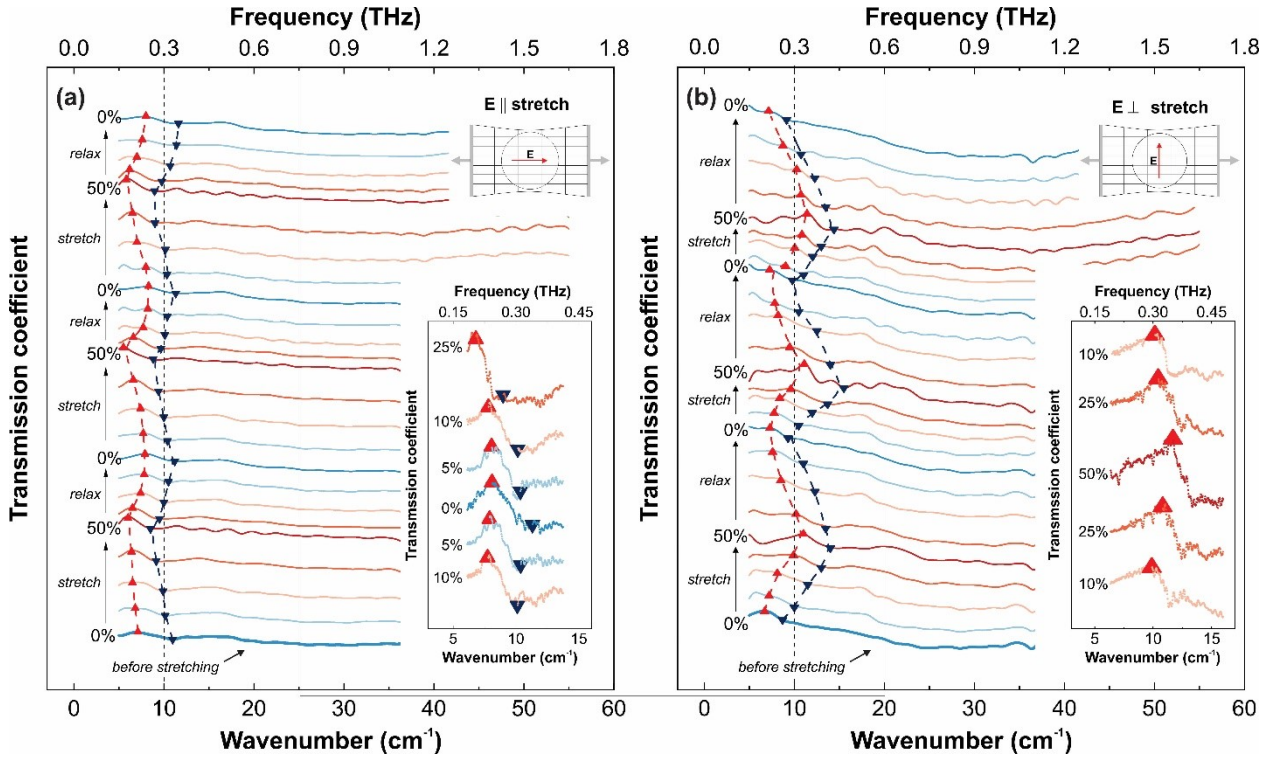


Рис. 3. Серия спектров пропускания сетки из ОУНТ с периодом 1 мм на эластомере, записанных при последовательных растяжениях (stretch) и «сжатиях» (relax). E-вектор излучения (*a*) параллелен и (*b*) перпендикулярен направлению растяжения. Спектры на вставках демонстрируют дифракционную картину более детально

Литература

1. *Harris P. J. F.* Carbon nanotubes and related structures: new materials for the twenty-first century. — Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
2. *Meyyappan M.* Carbon nanotubes: science and applications. — Boca Raton: CRC Press, 2005.
3. *Ilatovskii D. A.* [et al.]. Transparent Conducting Films Based on Carbon Nanotubes: Rational Design toward the Theoretical Limit // Advanced Science. 2022. V. 9(24): 2201673.
4. *Zhang Q.* [et al.]. Recent Developments in Single-Walled Carbon Nanotube Thin Films Fabricated by Dry Floating Catalyst Chemical Vapor Deposition // Top Curr Chem. 2017. V. 375(6): 90.
5. *Katyba G. M.* [et al.]. Tunable THz flat zone plate based on stretchable single-walled carbon nanotube thin film // Optica. 2023. V. 10(1). P. 53–61.
6. *Wood R. W.* Anomalous Diffraction Gratings // Phys Rev. 1935. V. 48(12). P. 928-936.
7. *Novikov I. V.* [et al.]. Fast liquid-free patterning of SWCNT films for electronic and optical applications // Chemical Engineering Journal. 2024. V. 485: 149733.

Секция сверхпроводимости, низких температур и квантовых материалов

Председатель: В. М. Пудалов (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: Т. Е. Кузьмичева (к. ф.-м. н.)

Секретарь: А. Э. Борисов

Дата: 05.04.2024 Время: 10:00

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

SnS-андреевская спектроскопия сверхпроводящего $NaFe_{1-x}Co_xAs$

***А. Д. Ильина*[1,2], *С. А. Кузьмичев*[3,1], *И. А. Никитченков*[3,1], *И. В. Морозов*[3], *А. И. Шилов*[1], *Е. О. Рахманов*[3,1], *Т. Е. Кузьмичева*[1]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Слоистое соединение $NaFe_{1-x}Co_xAs$ относят к группе 111 железосодержащих сверхпроводящих (СП) пниктидов. Образец остается магнитным при слабом электронном допировании, температуры магнитного и структурного перехода в стехиометрическом составе $T_m \approx 43$ K и $T_s \approx 55$ K соответственно. Переход в СП состояние на фазовой диаграмме достигается при максимальной критической температуре $T_c \approx 22$ K, $x \approx 0.03$ [1]. Такие двойственные свойства объясняются наличием естественного фазового расслоения в объемном кристалле: СП и магнитная фазы разделены в реальном пространстве. Исследование образцов осложняется быстрой деградацией в присутствии даже следовых количеств кислорода и паров воды, поэтому эксперимент требуется проводить в защитной атмосфере. На поверхности Ферми по результатам ARPES [2] присутствует дырочный цилиндр около Г-точки зоны Бриллюэна и вложенные электронные цилиндры около М-точки, каждая зона вносит вклад в сверхпроводимость ниже T_c.

Целью нашей работы было определение величин СП щелей и их температурных зависимостей в $NaFe_{1-x}Co_xAs$ методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО), а также исследование температурного поведения повышенной андреевской динамической проводимости (ДП) при нулевом напряжении смещения $G_{ZBC}^{A}(T)$.

В исследованных монокристаллах номинального состава $NaFe_{0.979}Co_{0.021}As$, выращенных методом кристаллизации из раствора в расплаве из собственных компонентов (“self- flux”), при T = 4.2 K создавались контакты на микротрещине (техника «break-junction» [3]) типа сверхпроводник-нормальный металл-сверхпроводник (SnS). Нами были проведены измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) и спектров ДП андреевских баллистических контактов на основе железосодержащего арсенида с СП фазой Na(Fe,Co)As с критической температурой перехода $T_c^{onset} \approx 21.5$ K. При анализе ВАХ при гелиевой температуре T = 4.2 K обнаружены такие признаки реализации эффекта МАО, в соответствии с теоретическими моделями [4,5], как: повышенная проводимость при eV = 0, избыточный андреевский ток во всем диапазоне напряжений смещения, а также наличие субгармонической структуры (СГС) на значениях $eV_n(0) = 2\Delta(0)/n$, где n — натуральное число (на спектрах ДП наблюдаются острые минимумы); отсутствие сверхтоковой ветви на напряжении eV = 0 говорит о том, что режим некогерентный. На спектрах ДП разрешимы особенности на напряжениях смещения $|eV| \approx 10.4$ и 6.2 meV, интерпретированные как дублетная особенность (вид которой теоретически предсказан для эффектра МАО в контактах на основе сверхпроводников с анизотропной СП щелью [6]). Определены края анизотропной СП щели — наименьшее и наибольшее значения энергии связи куперовских пар в данных зонах $2\Delta_L^{out} \approx 10.4$ meV и $2\Delta_L^{in} \approx 6.2$ meV. Обнаруженные особенности при малых смещениях соответствуют малой СП щели $\Delta_S(0) \approx 1.1$ meV.

Чтобы обосновать наблюдение именно эффекта МАО, построили температурные зависимости $G_{ZBC}^{A}(T)$ для контактов с различными значениями сопротивления в нормальном состоянии и различными параметрами прозрачности. Теоретическое предсказание поведения величины нормированной андреевской ДП при eV = 0 в модели [4] в случае двухщелевой сверхпроводимости:

$$\frac{G_{ZBC}^{A}(T)}{G_N} \propto (1-a)\tanh\frac{\Delta L(T)}{2kB\,T} + a\,\tanh\frac{\Delta S(T)}{2kB\,T} \qquad (1)$$

где G_N — ДП контакта в нормальном состоянии выше T_c, k_B — константа Больцмана, a — парциальный множитель, определяющий вклад электронов зон с большой и малой СП щелями в $G_{ZBC}^{A}(T)$.

В качестве $\Delta_S(T)$ взяли экспериментальные положения минимумов СГС на температурных спектрах ДП в зависимости от температуры, а в качестве $\Delta_L(T)$ для случая анизотропной СП щели — как среднее значение между $\Delta_L^{in}(T)$ и $\Delta_L^{out}(T)$. На рис. 1 представлены экспериментальные температурные зависимости проводимостей $G_{ZBC}^{A}(T)$, а также отдельно первое и второе слагаемое формулы (1). При $T < 0.5T_c$ полученные $G_{ZBC}^{A}(T)$ проходят между теоретическими кривыми и могут быть описаны в рамках двухщелевой модели с использованием экспериментальных $\Delta_{L,S}(T)$ с подобранным множителем $0 < a < 0.5$. Заметное падение $G_{ZBC}^{A}(T)$ в близи T_c может быть вызвано пониженной плотностью электронных состояний вблизи уровня Ферми, характерной для железосодержащих СП, и/или сильным неупругим рассеянием электронов в процессе МАО.

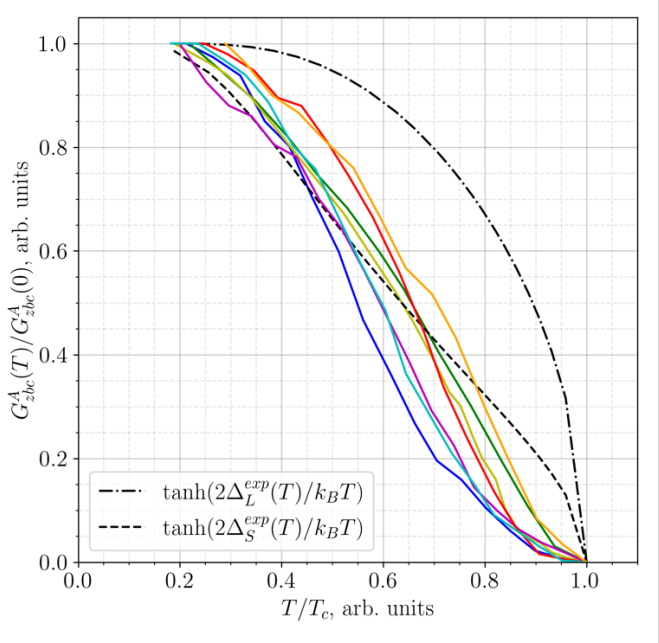


Рис. 1. Температурные зависимости экспериментальной андреевской проводимости при нулевом смещении $G_{ZBC}^{A}(T)$ в SnS-андреевских контактах на основе СП $NaFe_{1-x}Co_xAs$, нормированных на свое значение при T = 4.2 K (цветные сплошные линии). Штрихпунктирной и штриховой линиями показаны теоретические [4] вклады двух эффективных зон с $G_{ZBC}^{A}(T)$ на основе экспериментальных кривых $\Delta_{L,S}(T)$. Шкала температуры в абс. ед. нормирована на T_c

Литература

1. *Kuzmicheva T. E., Kuzmichev S. A.* Electron and Superconducting Properties of the AFeAs (A= Li, Na) Family Alkali-Metal Pnictides: Current Stage of the Research (mini-review) // JETP Letters. 2021. V. 114(10). P. 630–642.
2. *Ge Q. Q.* [et al.]. Anisotropic but Nodeless Superconducting Gap in the Presence of Spin-Density Wave in Iron-Pnictide Superconductor NaFe1−xCoxAs // Phys. Rev. X. 2013. V. 3(1). P. 011020–011026.
3. *Кузьмичев С. А., Кузьмичева Т. Е.* Техника “break-junction” применительно к слоистым сверхпроводникам // Физика низких температур. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
4. *Gunsenheimer U. , Zaikin A. D.* Ballistic charge transport in superconducting weak links // Phys. Rev. B. 1994. V. 50(9). P. 6317–6331.
5. *Kuemmel R.* Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting metallic weak links // Phys. Rev. B. 1990. V. 42(7). P. 3992–4009.
6. *Devereaux T. P., Fulde P.* Multiple Andreev scattering in superconductor–normal metal–superconductor junctions as a test for anisotropic electron pairing // Phys. Rev. B. 1993.V. 47(21). P. 14638–14641.

УДК 538.945

Андреевская спектроскопия KCa2Fe4As4F2

***А. Т. Даниярходжаев*[1,2]**

[1]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Соединение $KCa_2Fe_4As_4F_2$ относится к новому классу 12442 железосодержащих сверхпроводников, которые представляют особый интерес.

В данной работе были исследованы спектры андреевских отражений в поликристаллических образцах $KCa_2Fe_4As_4F_2$ в контактах на основе микротрещины (Break–Junction). Измерения спектров дифференциальной проводимости проводились по четырехконтактной схеме с использованием синхронного детектирования. Микротрещина формировалась при минимально достижимой температуре (1,6 К), что позволяло получать чистый криогенный скол.

В туннельных контактах при $T < T_c$ на дифференциальной проводимости наблюдаются минимумы при напряжениях смещения $V_b = 2\Delta/en$, где Δ — значение сверхпроводящей щели, e — элементарный заряд, n — количество андреевских отражений [1]. В случае сверхпроводника с несколькими щелями серия минимумов будут наблюдаться от каждой из щелей.

На измеренных спектрах дифференциальной проводимости наблюдались два минимума, из положения которых были напрямую определены значения большой и малой щелей: $\Delta_L = 6{,}8 \pm 0{,}5$ мэВ, $\Delta_S = 3{,}2 \pm 0{,}3$ мэВ. Полученные температурные зависимости параметров порядка $\Delta_L(T)$ и $\Delta_S(T)$ отличаются от предсказаний теории БКШ. Форма андреевских минимумов симметрична, что соответствует щелевым состояниям с симметрией *s*-типа.

Результаты исследования подробно представлены в статье [2].

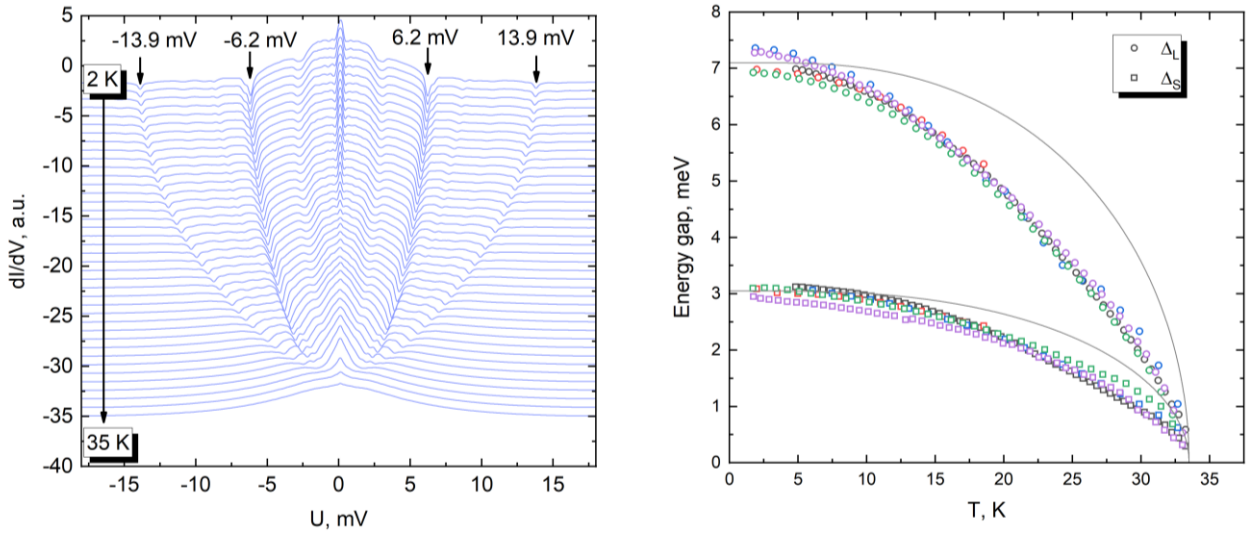


Рис. 1. Температурная зависимость андреевского спектра контакта, на которой видны минимумы большой и малой щелевых особенностей (слева) и зависимость щелевых особенностей от температуры, полученная по положениям минимумов на андреевских спектрах для разных образцов, серыми линиями отмечены БКШ-кривые (справа)

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 23-12-00307.

Литература

1. *Kümmel R.* [et al.]. Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting metallic weak links // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992—4009.
2. *Sadakov A. V.* [et al.]. Multiband Superconductivity in $KCa_2Fe_4As_4F_2$ // JETP Lett. 2024. V. 119. P. 111—117.

УДК 538.945.9

Влияние дефектной структуры на сверхпроводящие свойства в пниктидах и селенидах железа на основе щелочных металлов

***А. А. Дегтяренко*[1], *И. В. Морозов*[2], *Е. О. Рахманов*[2], *В. А. Амеличев*[3], *Л. А. Моргун*[1], *И. В. Жувагин*[1], *А. И. Шилов*[1], *С. Ю. Гаврилкин*[1], *А. Ю. Цветков*[1], *С. А. Кузьмичев*[2], *Т. Е. Кузьмичева*[1]**

[1]Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга, ФИАН
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[3]С-Инновации

Слоистые сверхпроводящие соединения склонны к образованию дефектов: планарных, точечных, столбчатых и т. д. [1–3]. Такие включения в объеме материала могут выступать в качестве центров пиннинга вихрей Абрикосова [4]. В данной работе были исследованы монокристаллы пниктида железа $NaFe_{1-x}Co_xAs$ и селенида $K_xFe_{2-y}Se_{2-z}S_z$, выращенные методом «self–flux» [5]. Высокое качество монокристаллов для обоих образцов подтверждено данными рентгеновской дифракции, измерениями зависимости магнитной восприимчивости χ (T) и сопротивления R (T) от температуры. Дефектная структура на атомарном уровне была детально изучена с помощью электронной микроскопии высокого разрешения. Исследовано влияние дефектов на механизм пиннинга в монокристаллах $NaFe_{1-x}Co_xAs$ и $K_xFe_{2-y}Se_{2-z}S_z$.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22–72–10082.

Литература

1. *Ishida S.* [et al.]. Unique defect structure and advantageous vortex pinning properties in superconducting $CaKFe_4As_4$ // NPJ Quant. Mater. 2019. V. 4: 272019.
2. *Ovcharov A. V.* [et al.]. Microstructure and superconducting properties of high-rate PLD-derived $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ coated conductors with $BaSnO_3$ and $BaZrO_3$ pinning centers // Sci Rep. 2010. V. 9: 215235.
3. *Degtyarenko A. Y.* [et al.]. Synthesis and HRTEM Investigation of $EuRbFe_4As_4$ Superconductor // Nanomater. 2022. V. 12: 3801.
4. *Abrikosov A. A.* [et al.]. On the Magnetic Properties of Superconductors of the Second Group // Sov. Phys. JETP 1957. V.5: 1174.
5. *Kuzmichev S. A.* [et al.]. Multiple Andreev Reflection Effect Spectroscopy of Underdoped $NaFe_{1-x}Co_xAs$ Single Crystals // JETP Lett. 2023. V. 117(8). P. 612–617.

УДК 538.9

Фазовое расслоение в монокристалле $EuSn_2As_2$

***А. Ю. Дегтяренко*[1], *А. Л. Васильев*[2] *Н. С. Павлов*[3], *А. В. Овчаров*[4], *В. И. Бондаренко*[2], *А. В. Садаков*[1], *К. С. Перваков*[1], *В. М. Пудалов*[1]**

[1]Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга, ФИАН
[2]Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
[3]Институт электрофизики РАН
[4]НИЦ «Курчатовский институт»

В настоящее время активно исследуются слоистые материалы с нетривиальной структурой и магнитным упорядочением решетки. В слоистом полуметалле $EuSn_2As_2$ с антиферромагнитным (AFM) упорядочением подрешетки Eu^{2+} в плоскости ab [1–3] выявлено ряд интересных особенностей касающихся магнитных свойств, а именно в DC–транспорте и электронном спиновом резонансе. В частности, при DC–намагничивании (H || ab) имеется слабая нелинейность в малых полях (< 0,03T). При исследовании зависимости магнитной восприимчивости от температуры (H || ab) наблюдается скачок в сторону низких температур в том же интервале малых полей [3, 4– 6], а в измерениях электронного спинового резонанса спектр ESR содержит дополнительную линию [7], не имеющую отношения к резонансу AFM. В данной работе мы экспериментально установили, что выявленные интересные особенности обусловлены наличием планарных нанодефектов, распределенных равномерно в объемном AFM монокристалле $EuSn_2As_2$.

Используя просвечивающую электронную микроскопию высокого разрешения (HRTEM), мы обнаружили, что в объеме монокристалла $EuSn_2As_2$ имеются планарные дефекты, объемная доля которых составляет порядка 4%. Выявленные дефекты состоят из трех плоскостей атомов Eu с Sn и уменьшенным

количеством атомов As между ними. С помощью комбинации методик EDX, HAADF и EELS мы идентифицировали локальную фазу как $EuSnAs_2$. Из-за уменьшенного расстояния между Eu плоскостями в планарном нанодефекте атомы Eu^{2+} испытывают слабое ферромагнитное (FM) упорядочение при температуре ниже ~ 25 K. Измерения намагниченности M(H) в слабых полях действительно выявили гистерезис ферромагнитного типа, а DFT–расчеты дефекта подтвердили слабый внутриплоскостной ферромагнитный момент. Наличие FM нанодефектов $EuSnAs_2$ в объемном AFM монокристалле $EuSn_2As_2$ ответственно за описанные выше особенности в транспортных и магнитных свойствах. С другой стороны, такой природный метаматериал представляет собой интересный объект для исследований, а также может найти практическое применение.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ (#21-52-12043).

Литература

1. *Otrokov M.M.* [et al.]. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // Nature. 2019. V. 576. P. 416–422.
2. *Wang P.* [et al.]. Intrinsic magnetic topological insulators // Innov. 2021. V. 2: 100098.
3. *Pakhira S.* [et al.]. A-type antiferromagnetic order and magnetic phase diagram of the trigonal Eu spin –7/2 triangular-lattice compound $EuSn_2As_2$ // Phys.Rev.B. 2021. V. 104: 174427.
4. *Li H.* [et al.]. Dirac Surface States in Intrinsic Magnetic Toplogical Insulators $EuSn_2As_2$ and $MnBi_{2n}Te_{3n+1}$ // Phys. Rev. X. 2019. V. 9: 041039.
5. *Chen H.-C.* [et al.]. Negative Magnetoresistance in Antiferromagnetic Topological Insulator $EuSn_2As_2$ // Chin Phys. Lett. 2020. V. 37: 047201.
6. *Li H.* [et al.]. Magnetic properties of the layered magnetic topological insulator $EuSn_2As_2$ // Phys.Rev.B. 2021. V. 104: 054435.
7. *Golovchansky I. A.* [et al.]. Magnetic properties of the layered magnetic topological insulator $EuSn_2As_2$ // J. Supercond. Nov. Magn. 2022. V. 562: 169713.

УДК 621.317.33, 536.483

Изучение транспортных свойств топологического изолятора $SrSn_2As_2$

***А. А. Лычагина*[1,2], *С. Ю. Гаврилкин*[2], *И. В. Жувагин*[2], *В. А. Власенко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН

$SrSn_2As_2$ является гексагональным слоистым материалом, состоящим из слоев Sn-As-Sr-Sn-As, связанных силой Ван-дер-Ваальса и образующих точечную группу типа $R\bar{3}m$. Согласно теоретическим предсказаниям, данный материал может быть топологическим изолятором. [1] Полученные экспериментальные данные в работе [2] на ARPES совместно с расчетом зонной структуры позволили авторам сделать вывод, что $SrSn_2As_2$ может быть материалом с топологическими свойствами. Учитывая, что в данном структурном семействе существуют как сверхпроводящие соединения ($NaSn_2As_2$) [3], так и магнитное ($EuSn_2As_2$) [4] можно предположить, что данное семейство представляет собой удобную площадку для исследования топологической сверхпроводимости с майорановскими связанными состояниями.

Измерения транспортных электронных свойств проводились на установке PPMS-9 с использованием стандартной шестиконтактной измерительной схемы. Для работы отбирались монокристаллы с минимальными дефектами поверхности (т.е. без царапин и сколов) и проводились рентгенографические исследования в кристаллографическом направлении 00l. Для подтверждения состава проводился элементный анализ, усредненный по пяти точкам. Результат элементного анализа, полученного методом энергодисперионной спектрометрии (ЭДС), дает соотношения элементов Sr : Sn:As = 0,954(6) : 2,154(6) : 1,891(7).

В результате магнитотранспортных измерений были получены температурные зависимости сопротивления монокристалла $SrSn_2As_2$, где наблюдался полупроводниковый ход кривой при высокой температуре порядка 190 K, что можно интерпретировать как постепенное уменьшение числа объемных носителей. При температуре ниже 190 K характер температурной зависимости указывает на признаки металлической проводимости, далее сопротивление монокристалла остается почти постоянным для температуры ниже 10 K. Аналогичное поведение при низких температурах наблюдалось и во многих других тонких пленках и наноструктурах топологических изоляторов [5]. В то же время сопротивление значительно меньше, чем в Bi_2Se_3, что экспериментально свидетельствует в пользу не топологической природы данного материала.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-12-00307, с использованием оборудования ЦКП ФИАН.

Литература

1. *Gibson Q.* [et al.]. Three-dimensional Dirac semimetals: Design principles and predictions of new materials // Phys. Rev. B. 2015. V. 91(20): 205128.
2. *Rong L.Y.* [et al.]. Electronic structure of $SrSn_2As_2$ near the topological critical point // Sci Rep. 2017. V. 7(1): 6133.
3. *Goto Y.* [et al.]. SNAS-based layered superconductor $NaSn_2As_2$ // Phys. Rev. B. 2021. V. 86(12): 054435.
4. *Li H.* [et al.]. Magnetic properties of the layered magnetic topological insulator // Phys. Rev. B. 2021. V. 104(5): 054435.
5. *Tang J.* [et al.]. Electrical detection of spin-polarized surface states conduction in $(Bi_{0.53}Sb_{0.47})_2Te_3$ topological insulator // Nano letters. 2014. V. 14(9). P. 5423–5429.

УДК 538.915, 538.971

Исследование электронной и магнитной структуры магнитных топологических изоляторов на основе $MnBi_2Te_4$

***А. А. Наумов*[1], *А. С. Фролов*[1,2]**

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

Во многих аспектах современной физики конденсированного состояния возникает необходимость создания многофункциональных материалов, имеющих уникальные электронные свойства. К таким материалам, в частности, относятся трехмерные топологические изоляторы (ТИ), которые представляют собой узкозонные полупроводники имеющие топологически-защищенные поверхностные состояния (ТПС) с дисперсией конуса Дирака на границе с тривиальным изолятором. Введение в структуру ТИ магнитного компонента приводит к возникновению запрещенной зоны в точке Дирака, вследствие обменного взаимодействия. Для таких материалов предсказано наличие ряда интересных эффектов, в частности квантового аномального эффекта Холла [1], что дает перспективу реализации таких материалов в спинтронных, магнетоэлектрических приборах, а также для топологически-защищенных квантовых вычислений.

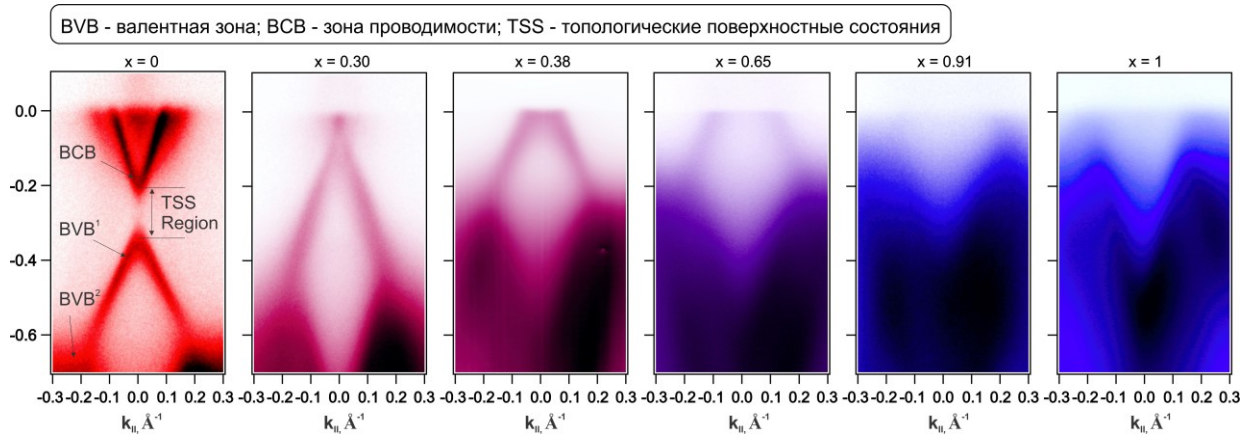


Рис. 1. Данные ФЭСУР для $Mn(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_4$ с x=0, 0,3, 0,38, 0,65, 0,91, 1

Особый интерес привлекают собственные магнитные ТИ (СМТИ), в которых магнитные атомы упорядоченно занимают выделенные кристаллографические позиции. Одним из представителей СМТИ является $MnBi_2Te_4$ [2]. MnBi2Te4 состоит из семислойных пакетов связанных Ван-дер-Ваальсовыми связями, в центре которых расположены атомы марганца. При этом, ниже температуры Нееля T_N=24.5K, внутри слоя устанавливается дальний ферромагнитный порядок, а между слоями — антиферромагнитный. $MnBi_2Te_4$ характеризуется электронным типом легирования, связанным с наличием собственных дефектов, который приводит к значительному подавлению вклада ТПС в сравнении с объемными в транспорте электронов. Для подавления вклада объемной проводимости, зонная структура топологических изоляторов должна быть модифицирована так, чтобы уровень Ферми и точка Дирака располагались в середине фундаментальной запрещенной зоны. Основным подходом к решению этой задачи является

оптимизация элементарного и дефектного состава твердых растворов с общей формулой $Mn(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_4$. Поскольку соединения с x=0 и 1 являются антиферромагнитными топологическими изоляторами, обладающими соответственно n и p типом проводимости, путем плавного изменения мольной доли $MnSb_2Te_4$ возможно получение электронейтрального образца.

В рамках данной работы, при помощи модифицированного метода Бриджмена были синтезированы образцы составов с x=0, 0,3, 0,38, 0,65, 0,91, 1. Электронная структура поверхности естественного скола (111)R монокристаллов изучена методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (рис. 1). Была установлена дисперсия состояний зоны проводимости и валентной зоны. Обнаружено, что в области мольных долей x<0,3 и x>0,38 образцы представляют собой вырожденные полупроводники n и p типа соответственно, а при x = 0,3–0,38 находится состав, близкий к точке электронейтральности, в котором может быть достигнута близость точки Дирака и уровня Ферми (рис. 2*а,б*). При этом, замена висмута на сурьму не приводит к появлению новых примесных состояний вблизи уровня Ферми.

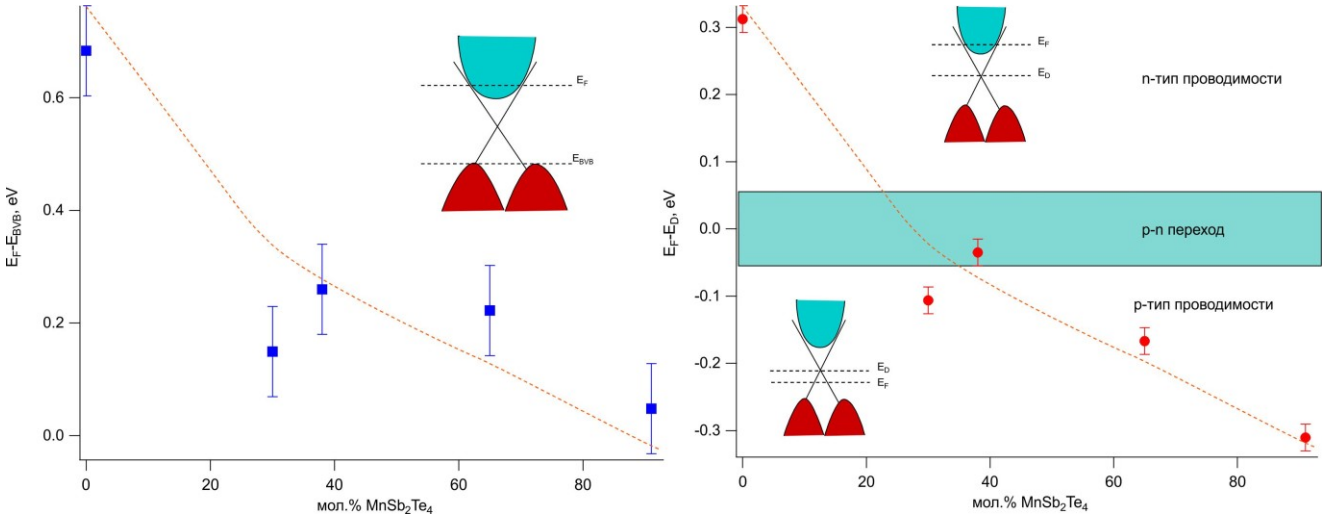


Рис. 2. Зависимости от составов: *а* — разности энергий уровня Ферми и дна валентной зоны; *б* — разности энергий уровня Ферми и положения точки Дирака

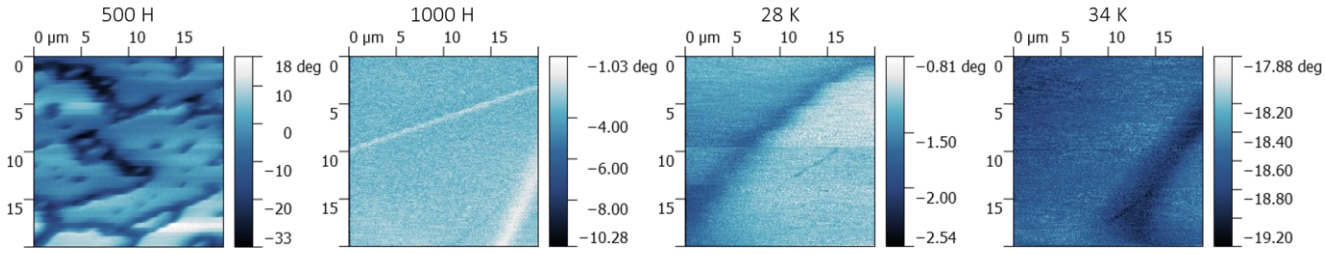


Рис. 3. Данные Магнитно-силовой микроскопии для $Mn(Bi_{0,09}Sb_{0,91})_2Te_4$

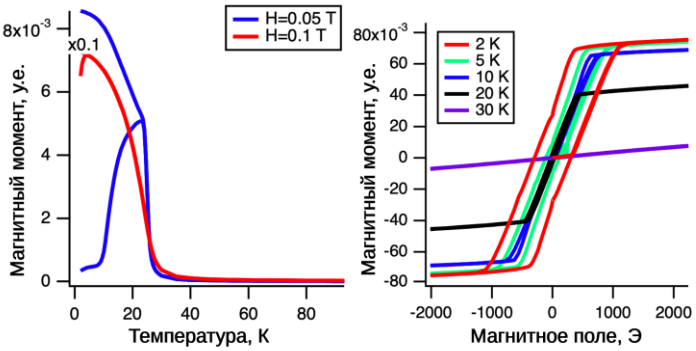


Рис. 4. Данные СКВИД-Магнетометрии для $Mn(Bi_{0,09}Sb_{0,91})_2Te_4$

Магнитная структура полученных образцов была изучена при помощи методов магнитно-силовой микроскопии (рис. 3) и СКВИД-магнетометрии (рис. 4). Было показано, что образец с x=0,91 имеет ферромагнитный тип упорядочения, характеризуемый температурой Кюри $T_{кюри}$=30 К и критическим полем

в промежутке 500–1000 эрстед. Изменение типа упорядочения по сравнению с составами с x=0 и 1 может быть обусловлено большой концентрацией антиструктурных дефектов $Mn_{Bi/Sb}$.

Литература

1. *Rui Yu* [et al.] Quantized Anomalous Hall Effect in Magnetic Topological Insulators // Science. 2010. V. 329. P. 61–64.
2. *Otrokov M. M., Klimovskikh I. I., Bentmann H.* [et al.]. Prediction and observation of the first antiferromagnetic topological insulator // Nature. 2019. V. 576. P. 416–422.

УДК 538.945

Влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в трехорбитальной модели ферропниктидов

***Д. А. Иванов*[1], *М. М. Коршунов*[1,2]**

[1]Сибирский федеральный университет
[2]Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

В данной работе рассматривается влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в трехорбитальной модели ферропниктидов в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**, 2]. В первом из рассмотренных вариантов используется только лишь z-компонента спин-орбитального взаимодействия [3], во втором же учтены сразу все его компоненты.

$$\hat{H}_z = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 \\ 0 & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z \\ i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k+Q}} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 \\ 0 & -i\frac{\lambda'}{2}\hat{\varepsilon}^z & 0 & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k+Q}} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^y \\ i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^y & -i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^z \\ i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^y & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k+Q}} + i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x + \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y \\ i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^y & -i\frac{\lambda\prime}{2}\hat{\varepsilon}^z & i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^x - \frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^y & \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k+Q}} - i\frac{\lambda}{2}\hat{\varepsilon}^z \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\hat{\varepsilon}^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\varepsilon}^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\varepsilon}^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Выше представлены гамильтонианы, учитывающие спин-орбитальное взаимодействие: , (2) — z-компонента, , (3) — все компоненты [1, 2]. Здесь $\hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}}$ и $\hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k+Q}}$ — матрицы 3×3, описывающие дисперсию электронов в трехорбитальной модели [1, 2], $\boldsymbol{Q} = (\pi, \pi)$, λ и λ' — константы спин-орбитального взаимодействия внутри одного атома железа и между двумя атомами железа в элементарной ячейке, соответственно.

Связь гамильтониана H_0 исходной модели с $\hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}}$ выражается с помощью операторов рождения и уничтожения:

$$H_0 = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{\psi}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma}\, \hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}} \hat{\psi}_{\boldsymbol{k},\sigma},$$

где $\hat{\psi}^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\sigma} = (c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}1\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}2\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}3\sigma})$ и $\hat{\psi}_{\boldsymbol{k},\sigma} = (c_{\boldsymbol{k}1\sigma}, c_{\boldsymbol{k}2\sigma}, c_{\boldsymbol{k}3\sigma})$ — векторы орбитального пространства, элементами которого являются операторы рождения и уничтожения соответственно. Явный вид элементов матрицы $\hat{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}}$ представлен в [2].

На рис.

Рис. 6. показан первый вариант для трех наборов параметров, зависящих от значений. Чем больше значения этих величин, тем сильнее происходит расщепление, при этом дополнительного нарушения симметрии отсутствует.

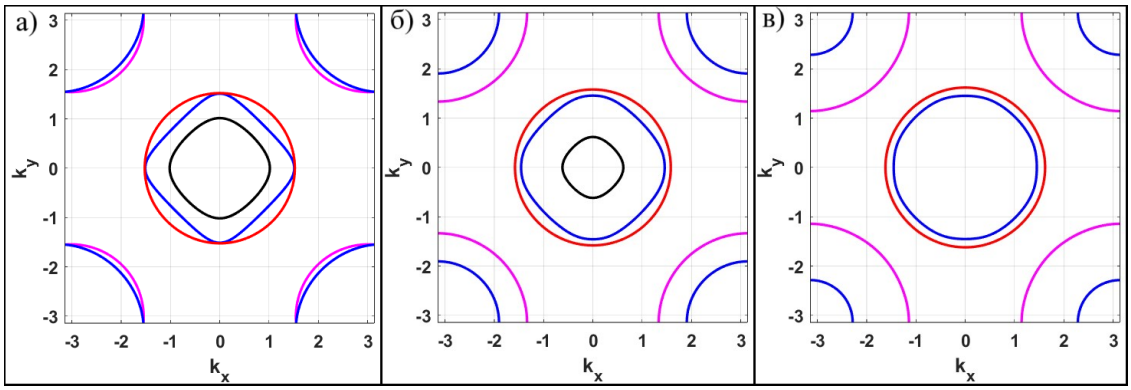


Рис. 6. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии z-компоненты спин-орбитального взаимодействия: *а* — $\lambda = \lambda' = 0$; *б* — $\lambda = \lambda' = 0{,}2$; *в* — $\lambda = \lambda' = 0{,}4$

Аналогичным образом, на рис. **Ошибка! Источник ссылки не найден.** представлен второй вариант, соответствующий учету всех компонент спин-орбитального взаимодействия.

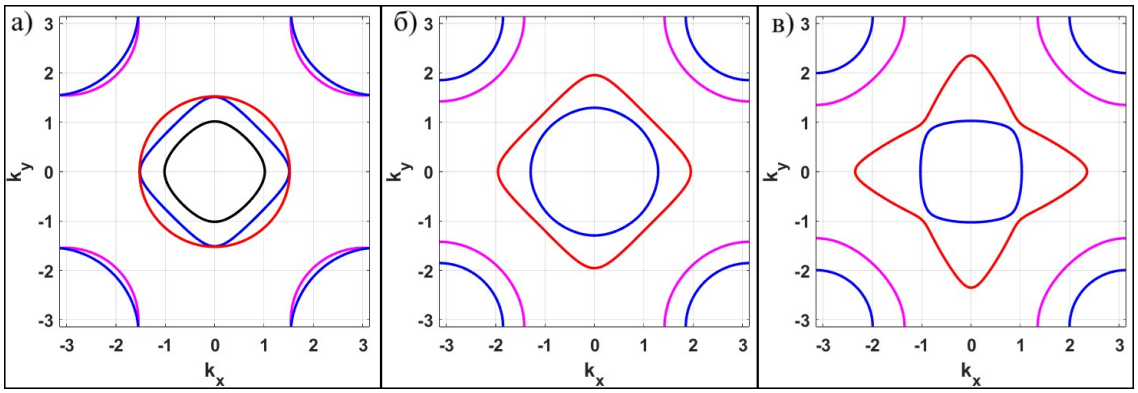


Рис. 7. Ферми-поверхность пниктида железа при наличии всех компонент спин-орбитального взаимодействия: *а* — $\lambda = \lambda' = 0$; *б* — $\lambda = \lambda' = 0{,}2$; в) $\lambda = \lambda' = 0{,}4$

Без учета спин-орбитального взаимодействия контуры вблизи точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ имеют пересечения вдоль направлений k_x и k_y. При учете спин-орбитального взаимодействия пересечения исчезают — контуры листов поверхности Ферми вблизи точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ из замкнутых становятся открытыми. Таким образом, в обоих случаях учета спин-орбитального взаимодействия, z-компоненты и всех компонент, межатомное спин-орбитальное взаимодействие приводит к топологическому переходу поверхности Ферми.

Литература

1. *Korshunov M. M., Togushova Y. N.* Band Structure Modification Due to the Spin-orbit Coupling in the Three-orbital Model for Iron Pnictides // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2018. 2018. V. 11(4). P. 430–437.
2. *Ivanov D. A., Togushova Y. N., Korshunov M. M.* Changes of the Fermi Surface Topology in the Three-orbital Model for Iron Pnictides with the Spin-orbit Coupling // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics 2023. 2023. V. 16(6). P. 795–803.
3. *Eremin I., Manske D., Bennemann K. H.* Electronic theory for the normal-state spin dynamics in Sr2RuO4: Anisotropy due to spin-orbit coupling // Phys. Rev. B. 2002. V. 65: 220502. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.220502.

УДК 538.955, 538.971

Поверхностный спин-флоп в магнитном топологическом изоляторе $Ge_{0.4}Mn_{0.6}Bi_2Te_4$

***Е. В. Понамарев*[1,2,3], *А. С. Фролов*[2,4], *В. С. Столяров*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Центр перспективных методов мезофизики и нанотехнологий
[3]Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
[4] Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Топологические изоляторы обладают необычным зонным спектром из-за состояний, реализованных на их поверхности. Сильное спин-орбитальное взаимодействие производит инверсию валентной зоны и зоны проводимости. Благодаря этому на поверхности реализуется топологическое состояние с линейным спин-поляризованным спектром — конусом Дирака. В объеме в спектре топологического изолятора находится запрещенная зона [1].

Наличие в образце магнитных примесей нарушает симметрию относительно обращения времени, за счет чего в спектре топологических состояний образуется щель [2]. Величина щели зависит от перпендикулярной поверхности топологического изолятора компоненты намагниченности [3]. Это создает мотивацию к исследованию магнитных эффектов в магнитных топологических изоляторах.

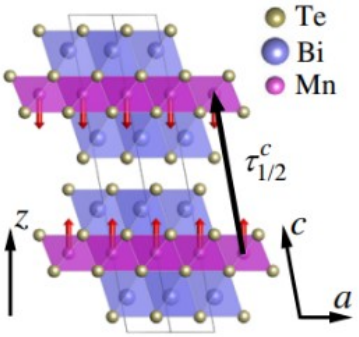


Рис. 1. Структура $MnBi_2Te_4$

Обусловленная наличием магнитных примесей щель в спектре топологических состояний была впервые обнаружена у $MnBi_2Te_4$ [4]. Он состоит из семиатомных слоев (рис. 1). В центре слоя находится магнитные атомы Mn, магнитные моменты которых связаны однонаправленно внутри слоя и антипараллельно между ними. Таким образом $MnBi_2Te_4$ является антиферромагнетиком и для него характерны поверхностный и объемный спин-флоп эффекты.

В рамках данной работы рассматривается образец допированный германием — $Ge_{0.4}Mn_{0.6}Bi_2Te_4$. Замена части атомов Mn на Ge приводит к разбавлению магнитной подрешетки [5] Ввиду того, что топологические состояния локализованы в близи верхнего слоя кристалла, изменение магнитной структуры приповерхностной области оказывает влияние на электронный спектр поверхности.

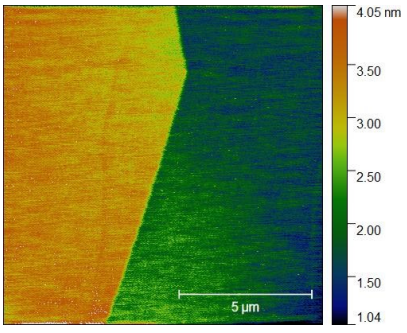


Рис. 2. Карта топографии образца, снятая в отсутствии внешнего поля

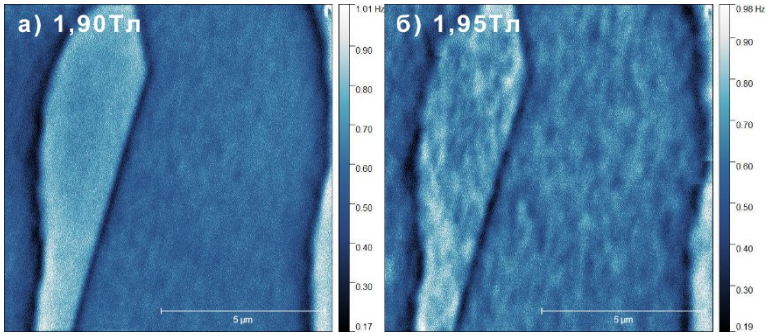


Рис. 3. Карты магнитного сигнала: *а* — 1,90Тл, б — 1,95Тл. На правом рисунке видны флуктуации намагниченности

Было проведено исследование $Ge_{0.4}Mn_{0.6}Bi_2Te_4$ методом криогенной магнитно-силовой микроскопии. Получены карты магнитного сигнала в полях: -6,100–2,025 Тл. Измерения для положительного и отрицательного направлений полей проводились в разных местах образца. Было обнаружено место, в котором можно одновременно видеть и монослоевую ступеньку и границу между доменами. Это видно на рис. 3 и рис. 4*а*.

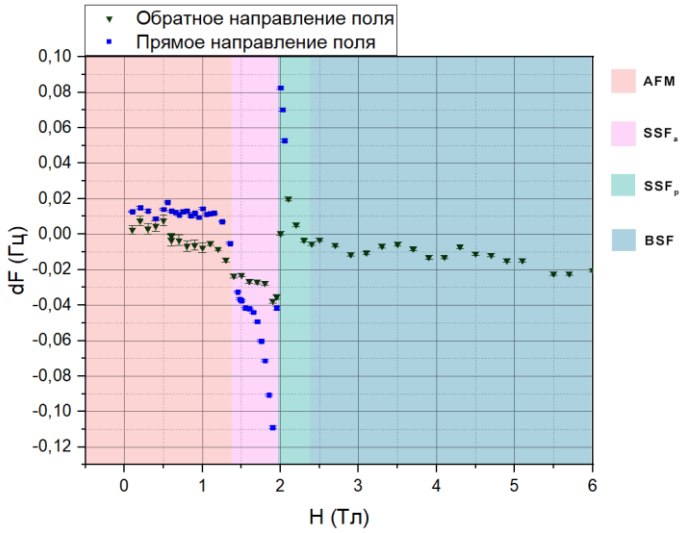


Рис. 4. Зависимость магнитного контраста от магнитного поля между доменами

Полученные данные сигнализируют, что объемный спин-флоп (BSF) эффект произошел при 2,4Тл. Так же мы видим, что поверхностный спин-флоп происходит при разных полях для двух видов доменов: при 1,4Тл для доменов, верхний слой которых направлен против поля (SSF_a), и при 1,9Тл для тех, у которых верхний слой сонаправлен с внешним полем (SSF_p).

При 1,95Тл была обнаружена флуктуационная фаза (рис. 3*б*), которая еще не наблюдалась ранее. Для ее исследования были проведены дополнительные измерения при разных температурах: 5,7–19,1К, а также при разных расстояниях от сканирующего зонда до образца: 50–150нм. Температура Нееля для данного образца равна 13К [5]. На основании этих данных сделано предположение о магнитное природе флуктуационной фазы.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-72-10074.

Литература

1. *Hasan M. Z., Kane C. L.* Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82(4). P. 3045–3067. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045.
2. *Chen Y. L., Chu J.-H.* [et al.]. Massive Dirac Fermion on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator // Science. 2010. V. 329(5992). P. 659–662. DOI: 10.1126/science.1189924.
3. *Hao Y.-J.* [et al.]. Gapless Surface Dirac Cone in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi2Te4 // Phys. Rev. X. 2019. V. 9(4): 041038. DOI: 10.1103/PhysRevX.9.041038.
4. *Otrokov M. M.* [et al.]. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator // Nature. 2019. V. 576(7787). P. 416–422. DOI: 10.1038/s41586-019-1840-9.
5. *Frolov A. S.* [et al.]. Magnetic Dirac semimetal state of (Mn,Ge)Bi_2Te_4 // arXiv preprint. [2023]. DOI: 10.48550/arXiv.2306.13024.

УДК 53.072

Изготовление прибора для измерения восприимчивости флейков слоистых сверхпроводников микронных размеров модуляционным методом

Е. М. Иванова

Национально-исследовательский университет «Московский институт электронной техники»

Измерение магнитной восприимчивости материалов с помощью катушек индуктивности — один из наиболее распространенных методов определения свойств сверхпроводников [1, 2]. Однако использование объемных проволочных катушек не позволяет с достаточной точностью измерять свойства образцов микронных размеров. Один из вариантов оптимизации метода — использование плоских катушек, размер которых составляет доли миллиметра [3]. В данной работе представлена разработка технологического процесса создания такой структуры для измерения восприимчивости сверхпроводящих флейков. Вид структуры показан на рис. 1. В ходе работ использовались такие методы формирования микроструктур, как масочная фотолитография, термическое и магнетронное напыление, жидкостное травление. В результате получен оптимальный технологический процесс для создания плоской катушки.

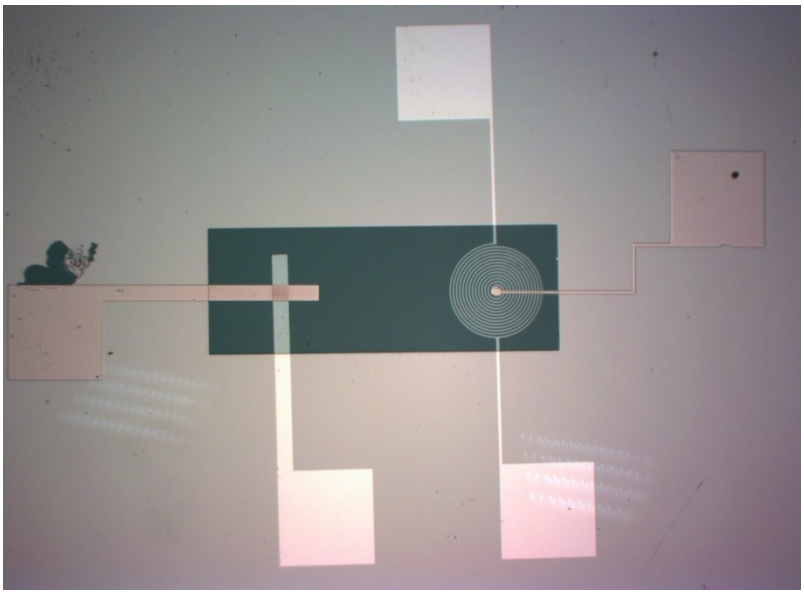


Рис. 1. Фотография готовой структуры

Литература

1. *Jash A.* [et al.]. A two-coil mutual inductance technique to study the conductivity of metal and measurement of the superconducting transient temperature // AIP Conference Proceedings. 2018. V. 1942(1): 060026.
2. *Huang X.* [et al.]. High-temperature superconductivity in sulfur hydride evidenced by alternating-current magnetic susceptibility // National Science Review. 2018. V. 6(4). P. 713–718.
3. *Jackson D. D.* [et al.]. Magnetic susceptibility measurements at high pressure using designer diamond anvils // Review of scientific instruments. 2003. V. 74(4). P. 2467–2461.

УДК 537.9

Туннельная спектроскопия пниктидов $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ с вариацией степени допирования в нормальном состоянии

И. А. Никитченков [1,2], С. А. Кузьмичев [1,2], К. С. Перваков [2], В. А. Власенко [2], А. Д. Ильина [2,3], Т. Е. Кузьмичева [2]

[1] МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет
[2] Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
[3] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

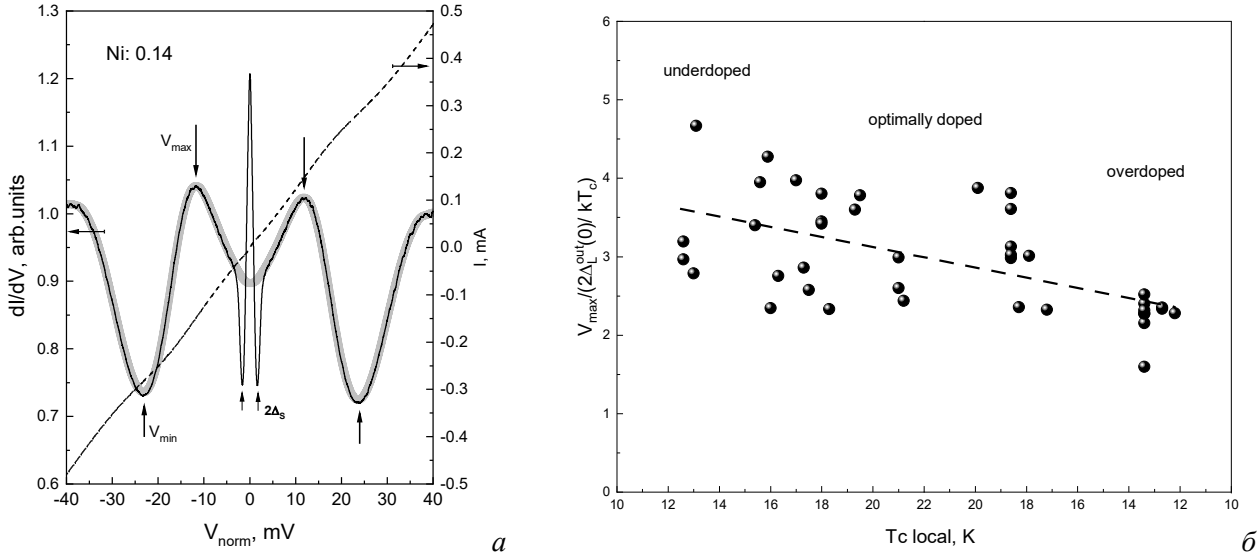
Соединения $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ имеют слоистую кристаллическую структуру, в которой сверхпроводящие (СП) блоки FeAs чередуются в *c*-направлении с плоскостями Ba. В стехиометрическом составе это соединение имеет дальний антиферромагнитный порядок. При электронном допировании антиферромагнетизм постепенно подавляется и возникает сверхпроводящая фаза, образующая «колокол», с максимальной критической температурой $T_c \approx 21$ К [1]. На поверхности Ферми присутствуют дырочные зоны около Г-точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры около М-точки; последние часто рассматривают как единую эффективную электронную зону. Ожидается, что при температурах ниже T_c на электронных листах поверхности Ферми образуется несколько СП конденсатов.

Мы исследовали монокристаллы $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ недо- и передопированных составов с x = 0.06 - 0.14 и T_c в диапазоне 12 — 21 К. В образцах при T = 4.2 К с помощью техники «break-junction» [2] создавались контакты на микротрещине типа сверхпроводник-барьер-сверхпроводник (ScS). Исследовались туннельные контакты в режиме, близком к баллистическому. Целью работы являлось исследование особенностей вольтамперных характеристик (ВАХ) и спектров динамической проводимости dI(V)/dV контактов в сверхпроводящем и нормальном состоянии.

Ниже T_c наблюдался эффект некогерентных многократных андреевских отражений (IMARE), вызывающий избыточный ток при любых смещениях eV, а также появление повышенной андреевской проводимости при нулевом смещении и щелевых минимумов при любых температурах вплоть до T_c [3]. При этом на ВАХ и dI(V)/dV наблюдалась не относящаяся к эффекту IMARE нелинейность, проявляющаяся как в СП, так и в нормальном состоянии (рис. 1а). Форма нелинейности dI(V)/dV схожа с «псевдощелью», наблюдаемой в высокотемпературных купратах. Ранее, подобная нелинейность уже наблюдалась нами для состава $BaFe_{1.88}Ni_{0.12}As_2$ [4]. Установлено, что положения особенностей и форма нелинейности dI(V)/dV-спектров не зависят от температуры в диапазоне 4.3–50 К, не зависят от нормального сопротивления контакта и не могут быть объяснены перегревом контактной области при протекании измерительного тока. Данные особенности нормального состояния воспроизводятся для всех исследованных контактов и связаны с внутренними свойствами исследуемого материала.

Формы особенностей схожи при различной степени электронного допирования и T_c. Однако при движении вдоль фазовой диаграммы меняются энергетические положения особенностей нелинейности на dI(V)/dV. Отношение положения максимума нелинейности V_{max} к характеристическому соотношению большой СП щели $2\Delta_L^{out}(0)/kT_c$ постепенно понижается при движении из недодопированной области фазовой диаграммы в передопированную. Учитывая, что согласно нашим данным отношение $2\Delta_L^{out}(0)/kT_c \approx 6$ сохраняется в исследуемой области допирования примерно постоянным, поведение особенностей нормального состояния оказывается не связанным напрямую со сверхпроводящими свойствами исследуемого соединения.

Известно, что спектр туннельного NcN-контакта (N — нормальный металл) определяется распределением плотности электронных состояний N(E) вблизи уровня Ферми [5]. Наблюдаемый эффект может быть обусловлен особенностями плотности электронных состояний $N(E_F) \neq \text{const}$ вблизи уровня Ферми вследствие топологии зонной структуры в $Ba(Fe,Ni)_2As_2$ или перенормировкой N(E) на взаимодействие с характерными бозонными модами [6], например нематическими флуктуациями.



а *б*

Рис. 1. ВАХ (штриховая линия, правая ось) и dI(V)/dV-спектры (черная линия, левая ось), измеренные при T = 4.6 K и в нормальном состоянии при T = 13.2 K ≈ T_c^{local} (серая жирная линия, левая ось) для SnS-контакта в монокристалле $BaFe_{1.86}Ni_{0.14}As_2$ сильно передопированного состава. Черными стрелками отмечены положения андреевских минимумов от малой сверхпроводящей щели $2\Delta_S \approx 1.6$ мэВ, вертикальными стрелками показаны положения особенностей dI(V)/dV нормального состояния — минимумов $V_{min} \approx 23.8$ мВ и максимумов $V_{max} \approx 11.8$ мВ (*а*). Отношение амплитуды максимума исследуемой нелинейности нормального состояния Vmax к характеристическому отношению большой щели $2\Delta_L^{out}(0)/kT_c$, полученное в широком диапазоне допирования (штриховая линия — линейная аппроксимация полученных данных) (*б*)

Литература

1. *X. Lu.* Phase Diagram and Magnetic Excitations of $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$: A Neutron Scattering Study. — Springer Theses, 2017.
2. *Кузьмичев С.А., Кузьмичева Т.Е.* Техника “break-junction” применительно к слоистым сверхпроводникам // Физика низких температур. 2016. Т. 42. № 11. С. 1284–1310.
3. *Kuemmel R.* [et al.]. Andreev scattering of quasiparticle wave packets and current-voltage characteristics of superconducting weak links // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 3992–4009.
4. *Nikitchenkov I. A., Ilina A. D.* [et al.]. Moscow Univ. Phys. Bull. 2023. V. 78(4). P. 521–526.
5. *Giaever I., Megerle K.* Study of Superconductors by Electron Tunneling // Phys. Rev. 1961. V. 112. P. 1101–1111.
6. *Свистунов В. М., Белоголовский М. А., Черняк О. И.* Туннельные исследования металлов в области высоких давлений // Успехи физических наук. 1987. Т. 151. С. 31–66.

УДК 537.9

Антиферромагнетизм Tb_2Te_5

***И. К. Шамова*[1], *О. С. Волкова*[1,2]**

[1]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС
[2]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Слоистые редкоземельные теллуриды $RETe_n$ (n = 2,5, 3) являются предметом обширных исследований в современной физике твердого тела. Они обладают слоистой структурой и демонстрируют широкий спектр квантовых кооперативных явлений, как то, волны зарядовой плотности (CDW), экзотический магнетизм и сверхпроводимость под давлением [1, 2]. Родительская фаза $RETe_3$ состоит из бислоев RETe, чередующихся с двойными квадратными плоскостями Te, как показано на левой панели рис. 1. Система $RETe_{2.5}$ (RE_2Te_5) содержит бислои RETe, чередующиеся с одинарным и двойным квадратным слоем Te, как показано на средней панели рис. 1. Фактически, основным магнитным элементом в обеих системах является полиэдр $RETe_9$, показанный на правой панели рис. 1 для тербиевых систем. Он состоит из одного апикального Te, расположенного вдоль оси c, четырех атомов Te практически в одной плоскости с редкоземельным атомом и четырех удаленных атомов Te из промежуточного слоя.

В работе [3] было показано, что в ряду редкоземельных тителлуридов $TbTe_3$ выделяется тремя магнитными фазовыми переходами при низких температурах среди других представителей семейства

теллуридов редкоземельных элементов. Все остальные представители семейства $RETe_3$ демонстрируют либо два, либо ни одного перехода. Фазовые переходы в $TbTe_3$ при T_{N1} = 6,7 и T_{N2} = 5,7 К происходят в соизмеримые антиферромагнитные структуры, описываемые волновыми векторами q_{m1} = (0,5,0,5,0) и q_{m2} = (0,0,0,5). Антиферромагнитная структура ниже T_{N3} =5,4 К несоизмерима.

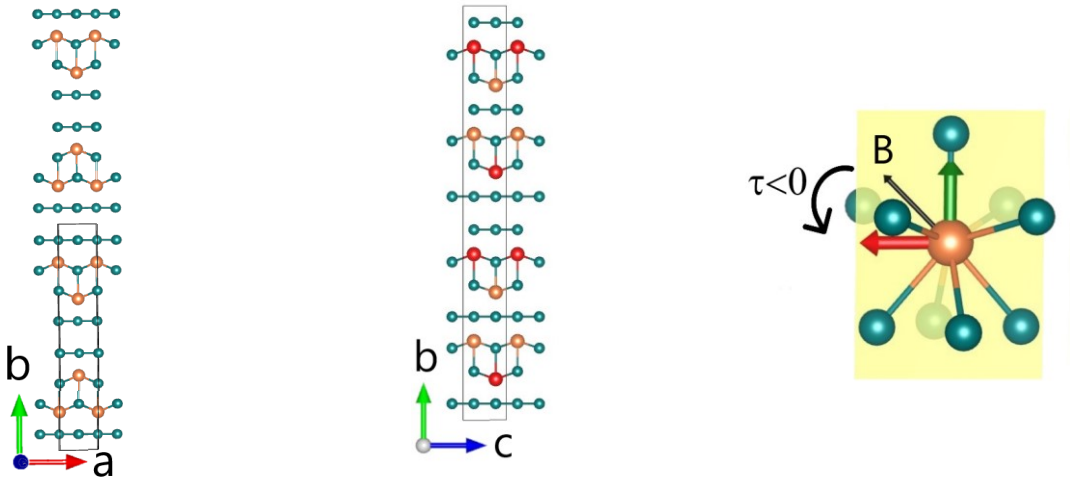


Рис. 1. *Слева*: кристаллическая структура $TbTe_3$. Двойные слои TbTe показаны соединенными большими и малыми сферами. Слои Te показаны соединенными маленькими сферами. *По центру*: кристаллическая структура Tb_2Te_5. Двойные бислои Tb_2Te_2 показаны соединенными большими и малыми сферами с промежуточным одинарным слоем Te. Большие сферы разного цвета — это два кристаллографических положения Tb. *Справа*: многогранник $TbTe_9$ с красной и зеленой стрелками, указывающими самое легкое и легкое направление магнитного момента Tb^{3+} соответственно. Магнитная легкая плоскость в $TbTe_3$ отмечена желтым цветом. Черная стрелка обозначает магнитное поле

В настоящей работе показано, что Tb_2Te_5 упорядочивается антиферромагнитно в два этапа при T_{N2} = 9,0 К и T_{N1} = 6,8 К, что проявляется в резких аномалиях на кривых магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости. На основе этих измерений были построены магнитные фазовые диаграммы Tb_2Te_5 при $H \parallel ac$, $H \parallel b$, показанные на рис. 2. Анизотропия иона Tb^{3+} отвечает типу легкая ось перпендикулярно плоскости ac, как следует из азимутальной зависимости вращающего момента.

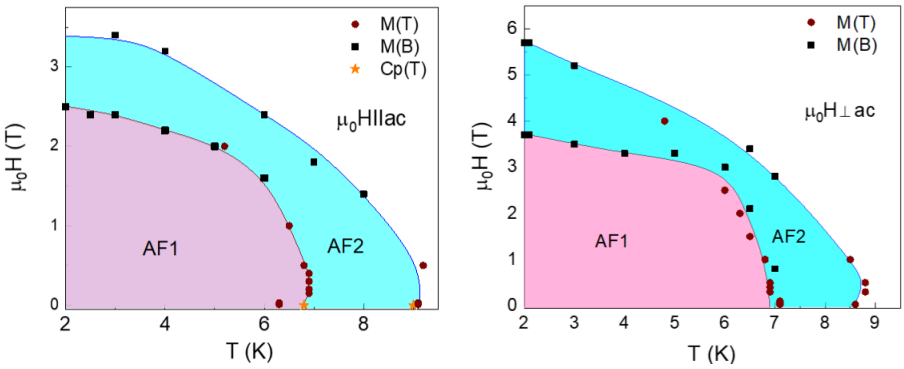


Рис. 2. Магнитные фазовые диаграммы кристалла Tb_2Te_5 в магнитном поле, ориентированного вдоль (левая панель) и перпендикулярно (правая панель) плоскости ac

Работа выполнена при поддержке гранта российского научного фонда 22-42-008002.

Литература

1. *Ru N.* [et al.]. Magnetic properties of the charge density wave compounds RTe_3 (R= Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, and Tm) // Physical Review B. 2008. V. 78(1): 012410.
2. *Shin K.Y.* [et al.]. Charge density wave formation in R_2Te_5 (R= Nd, Sm, and Gd) // Physical Review B. 2008. V. 77(16): 165101.
3. *Volkova O.S.* [et al.]. Magnetic Phase Diagram of van der Waals Antiferromagnet $TbTe_3$ // Materials. 2022. V. 15(24): 8772.

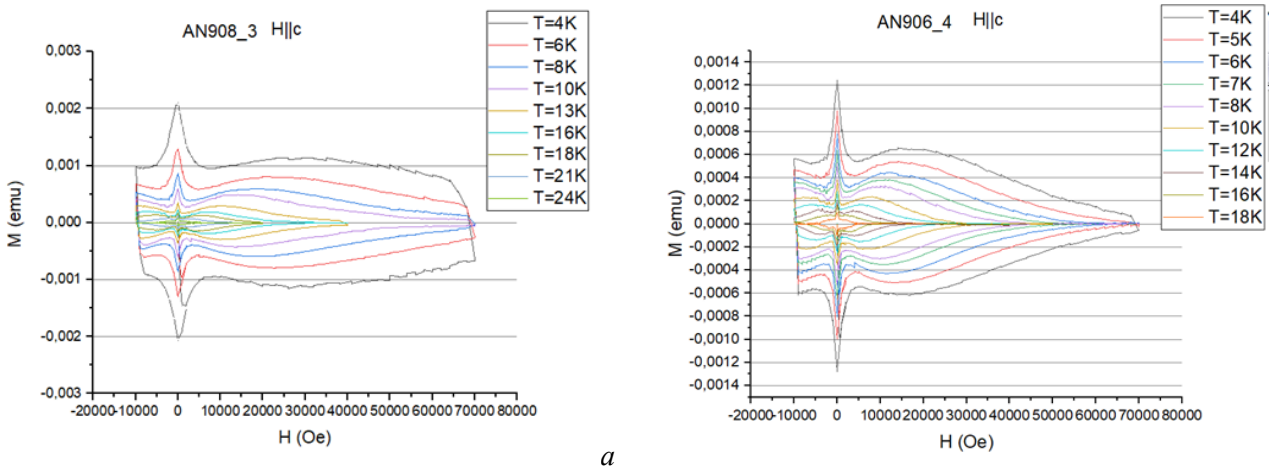
УДК 538.945

Исследование критического тока, силы пиннинга и фазы вихревого состояния в железосодержащих сверхпроводниках $PrFeAsO_xF_y$

***М. Д. Алиен*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2] Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

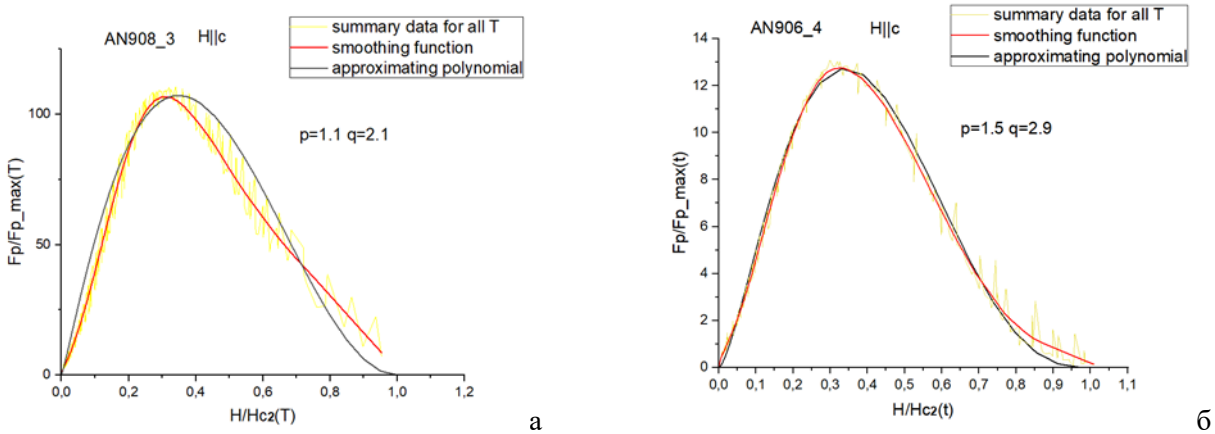
В настоящий момент одной из важных проблем в изучении высокотемпературных сверхпроводников на основе Fe-1111 является исследование механизмов закрепления вихревых потоков для различных типов легирования. В данной работе определяется тип пиннинга в сверхпроводниках $PrFeAsO_xF_y$, с разной степенью легирования. Для двух образцов была получена экспериментальная зависимость намагниченности M от напряженности внешнего магнитного поля H, при различных температурах ниже критической температуры данного сверхпроводника. Соответствующие графики приведены на рис.1.



а *б*

Рис. 1. Петли гистерезиса для двух образцов $PrFeAsO_xF_y$

Из данных зависимостей используя критическую модель Бина [1], и полагая силу пиннинга Fp равной произведению модуля силы критического тока Ic на модуль напряженности внешнего магнитного поля H, была найдена зависимость силы пиннинга Fp от напряженности внешнего магнитного поля H. Далее была сделана нормировка силы пиннинга Fp на величину максимальной силы пиннинга Fp_{max} для заданной температуры, и напряженности магнитного поля H на значение второго критического поля H_{c2} для заданной температуры. В итоге для каждого образца была получена зависимость $H/H_{c2}(T)$ от $Fp/Fp_{max}(T)$, практически для всего диапазона температур меньших критической температуры Tc. Соответствующие графики приведены на рис.2.



а б

Рис. 2. Зависимость силы пиннинга от внешнего магнитного поля

Данные зависимости были аппроксимированы функциями, приведенными ниже для двух образцов соответственно

$$f \sim h^{1.1}(1-h)^{2.1} \quad (1)$$

$$f \sim h^{1.5}(1-h)^{2.9} \quad (2)$$

где f — $Fp/Fp_{max}(T)$, а h — $H/H_{c2}(T)$

Также из графиков были определены значения максимумов $h(f_{max})$ = 0,33 для обоих образцов. Согласно статье D. Dew-Hughes (1974) [2] данные функции, с наибольшей точностью соответствуют точечному типу закрепления вихрей с нормальным центром.

Литература

1. *Bean P. C*. Magnetization of High-Field Superconductors // Rev. Mod. Phys. 1985. V. 36(1). P. 31–50.
2. *Dew-Hughes D*. Flux pinning mechanisms in type II superconductors // Philos. Mag. 1974. V. 30(2). P. 293–305.

УДК 538.945

СВЧ-генератор на основе Джозефсоновского перехода

***Р. Тюменев*[1], *Д. С. Калашников*[1,2], *В. С. Столяров*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ФГУП ВНИИА им. Н. Л. Духова

Физические системы, используемые для квантовых вычислений, работающие в микроволновом диапазоне, требуют передовой управляющей электроники, а использование интегрированных компонентов, работающих при температуре квантовых устройств, потенциально выгодно.

В данной работе рассматривается генератор, состоящий из джозефсоновского перехода, дополнительно шунтированного конденсатором и резистором, связанного с резонатором. Иллюстрация такой системы показана на рис. 1. Данный генератор предполагается использовать для управления сверхпроводящими кубитами в квантовом компьютере. Генератор, основанный на джозефсоновском переходе, работающий на частоте кубитов, был показан в работе [1], однако изготовление такой схемы трудоемко, из-за сложного литографического процесса. В данной работе предлагается использовать планарную технологию при изготовлении, что упростит технологический процесс, но внесет свои ограничения. Для этого было проведено моделирование всей системы генератора.

$$\beta\ddot{\varphi} + \dot{\varphi} + \sin(\varphi) = i_{dc} + i_{ac}\sin(W\tau) \quad (1)$$

где β — параметр МакКамбера, i_{dc} — постоянный ток накачки, нормированный на критический ток джозефсоновского перехода, i_{ac} — переменный генерируемый ток, нормированный на критический ток джозефсоновского перехода, W — частота генерируемого тока, нормированная на критическую частоту джозефсоновского перехода, τ — безрамзерное время.

Моделирование было проведено при помощи решения уравнения (1). В качестве критерия появления генерации переменного тока использовалось условие, описанное в работах [1], [2]. Для расчета импеданса использовался метод предложенный в [3], в нормированных величинах, с учетом баланса мощностей на нагрузке в виде резонатора:

$$Z_w = R_w + jX_w = \left(\frac{1}{Ti_w}\right)\int_0^{T\to\infty} \dot{\varphi}e^{jwt}dt \quad (2)$$

$$Re\left(Z_J(\omega)\right) = -R_1 \quad (3)$$

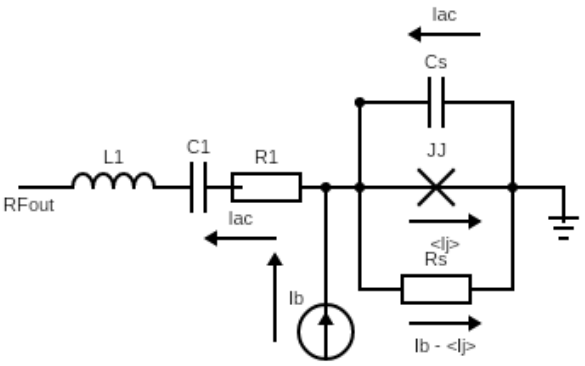


Рис. 1. Общая схема генератора, где R1, L1, C1 - параметры резонатора

Изготовление отдельных элементов генератора фиксирует большинство параметров при моделировании, что позволяет искать рабочую точку генератора с наибольшей возможной мощностью при изменении параметров, которые легче всего менять на практике в виде суммарного сопротивления и критического тока джозефсоновского перехода.

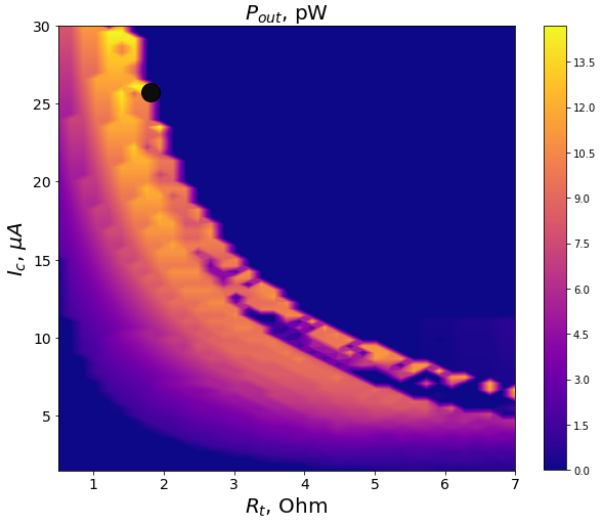


Рис. 2. Мощность генерации переменного тока на частоте работы кубитов в зависимости от критического тока джозефсоновского перехода и суммарного сопротивления

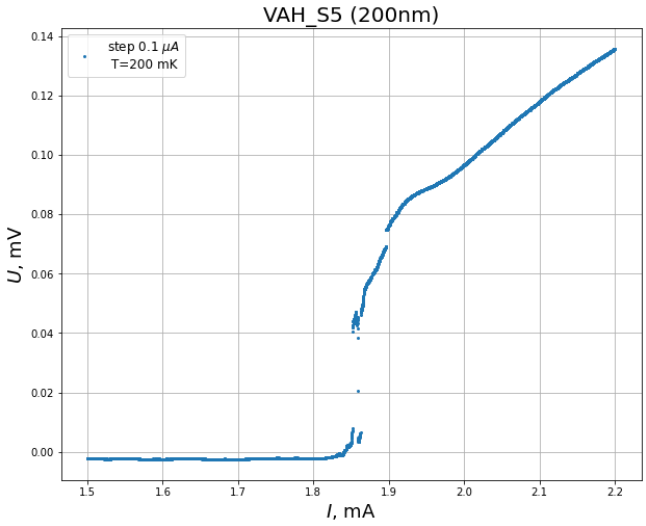


Рис. 3. Измеренная ВАХ образца генератора. На графике видна область с отрицательным дифференциальным сопротивлением, соответствующем генерации переменного тока

Литература

1. *Chengyu Y.* [et al.]. A low-noise on-chip coherent microwave source // Nature Electronics. 2021. V.4 P.885–892. DOI: 10.1038/s41928-021-00680-z.
2. *Hassel J.* [et al.]. Self-synchronization in distributed Josephson junction arrays studied using harmonic analysis and power balance // Appl. Phys. Lett. 2006. V.89: 072503. DOI: 10.1063/1.2337536.
3. *Zhai Z., Parimi P. V., Sridhar S.* Nonlinear microwave impedance of short and long Josephson junctions // Physical Review B. 1999. V.59: 9573. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.9573.

Секция алгебраической геометрии и математической физики

Председатель: А. А. Белавин (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: И. В. Каржеманов

Секретарь: И. В. Данилин

Дата: 05.04.2024 Время: 10:00

УДК 530.145

Корреляционные функции вырожденных полей в двумерной суперконформной теории поля

***А. Д. Иванова*[1], *А. В. Литвинов*[2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН
[3]Сколковский институт науки и технологий

Одной из основных проблем любой квантовой теории поля является вычисление корреляционных функций. Интерес представляют корреляторы в суперсимметричном случае. Такое расширение алгебры Вирасоро носит название NSR-алгебра. Она содержит в себе секторы Навье-Шварца и Рамона. Состояния в первом секторе допускают антипериодические условия для фермионных полей, а второй — периодические. Теория представлений NSR-алгебры, очень похожа на теорию представлений алгебры Вирасоро. Построение модуля Верма и сингулярных векторов происходит аналогично, но модернизируется до суперсимметричной версии посредством введения мод нового тока $G(z)$. В данной работе рассматривается NS-сектор и четырехточечные корреляционные функции.

Корреляционные функции примарных полей дополнительно ограничиваются, так называемыми проективными тождествами Уорда[1,2]

$$\langle T(z)\Phi_1(z_1)\dots\Phi_n(z_n)\rangle = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\Delta_k}{(z-z_k)^2}+\frac{\partial_k}{z-z_k}\right)\langle\,\Phi_1(z_1)\dots\Phi_n(z_n)\,\rangle \qquad (1)$$

$$\langle G(z)\dots\,\Phi_i(z_i)\dots\,\Psi_j(w_j)\dots\rangle = \sum_{i=1}^{n}\frac{\langle\dots\Psi_i(z_i)\dots\Psi_j(w_j)\dots\rangle}{z-z_i}+$$
$$+\sum_{j=1}^{m}(-1)^{j-1}\left(\frac{2\Delta_j}{(z-w_j)^2}+\frac{\partial_{w_j}}{z-w_j}\right)\langle\dots\Phi_i(z_i)\dots\Phi_j(w_j)\dots\rangle, \qquad (2)$$

где i пробегает по бозонам, j пробегает по фермионам.

Из (1) и (2) можно получить ограничения, возникающие из-за того, что любая корреляционная функция с участием $T(z)$ должна спадать на бесконечности как $\frac{1}{z^4}$, а с $G(z)$ — как $\frac{1}{z^3}$. Получаемая система уравнений позволяет выразить шесть корреляционных функций через полностью бозонный коррелятор. Оставшийся коррелятор можно получить из следующего уравнения на нуль-вектор на уровне $\frac{3}{2}$

$$G_{-\frac{1}{2}}\left(L_{-1}G_{-\frac{1}{2}}+b^2G_{-\frac{3}{2}}\right)|\Delta\rangle = 0 \qquad (3)$$

Таким образом, задача нахождения корреляционных функций сводится к нахождению $\langle\Phi(z,\bar{z})\Phi_1(z_1,\bar{z}_1)\Phi_2(z_2,\bar{z}_2)\Phi_3(z_3,\bar{z}_3)\rangle$.

Корреляционная функция, включающая вырожденное поле, удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению в частных производных, называемому BPZ- уравнением [1]. Степень этого уравнения определяется уровнем, на котором находится соответствующий сингулярный вектор. В

последующих рассуждениях можно временно забыть про антиголоморфную часть, для нее рассуждения аналогичны. Используя конформную инвариантность можно зафиксировать точки следующим образом: $(z, z_1, z_2, z_3) \to (x, 0, 1, \infty)$. Дополнительно сделав подстановку вида $\langle \Phi(x)\Phi_1(0)\Phi_2(1)\Phi_3(\infty)\rangle = x^{\alpha_1 b}\,(1-x)^{\alpha_2 b} F[x]$, получаем следующее дифференциальное уравнение вида

$$x^2(x-1)^2F'''[x] + \big(K_1 x + K_2(x-1)\big)x(x-1)F''[x] + \big(L_1 x^2 + L_2(x-1)^2 + L_3 x(x-1)\big)F'[x] + \\ + \big(M_1 x + M_2(x-1)\big)F[x] = 0 \qquad (4)$$

Решение уравнения (4) приводится в работе Доценко и Фатеева [3] в виде контурного интеграла. Совершая обратные преобразования для замены и конформной инвариантности, получаем решение всех корреляционных функций в интегральном представлении.

С помощью операторного разложения можно выразить *N*-точечные корреляционные функции через $(N-1)$-точечные. При этом происходит процедура слияния полей. В то же время, BPZ-уравнения накладывает ограничения на классы полей $[\Phi_\alpha]$, которые можно получить. При $z \to 0$, каждому классу $[\Phi_\alpha]$ можно сопоставить контурный интеграл из решения. Эти рассуждения позволяет найти отношения структурных констант для четырехточек, при фиксированной конформной инвариантности

$$\frac{C_{-b,\alpha_1}^{b\alpha_1} C(b\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)}{C_{-b,\alpha_1}^{1+b^2-b\alpha_1} C(1+b^2-b\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = \frac{1}{4} b^2\alpha_1^2\,(1+b^2-2b\alpha_1)^2\,\frac{\gamma\left(\frac{1}{2}\left(1+b(\alpha_1+\alpha_2-\alpha_3)\right)\right)\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b+\alpha_1+\alpha_2-\alpha_3)\right)}{\gamma\left(b(-b+\alpha_1)\right)\gamma(1+b\alpha_1)} \times \\ \times \frac{\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b+\alpha_1-\alpha_2+\alpha_3)\right)\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)\gamma\left(\frac{1}{2}\left(1+b(\alpha_1-\alpha_2+\alpha_3)\right)\right)}{\gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{b^2}{2}+b\alpha_1\right)^2\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b-\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)} \frac{\gamma\left(\frac{1}{2}\left(-1+b(-2b+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)\right)}{\gamma\left(\frac{1}{2}\left(1+b(-\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)\right)}, \qquad (5)$$

$$\frac{C_{-b,\alpha_1}^{1+b^2} C(1+b^2,\alpha_2,\ {}_3)}{C_{-b,\alpha_1}^{1+b^2-b\alpha_1} C(1+b^2-b\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = -\frac{b^2\alpha_1^2\left(1+b^2-2b\alpha_1\right)^2}{(1+b^2-b\alpha_1)^2}\,\frac{\gamma(1+b^2)\gamma\left(b(-b+\alpha_1)\right)\gamma\left(\frac{1}{2}\left(1+b(\alpha_1+\alpha_2-\alpha_3)\right)\right)}{\gamma\left(\frac{1}{2}(1+b^2)\right)\gamma(1+b\alpha_1)^2} \times \\ \times \frac{\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b+\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)\gamma\left(\frac{1}{2}\left(1+b(\alpha_1-\alpha_2+\alpha_3)\right)\right)}{\gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{b^2}{2}+b\alpha_1\right)\gamma\left(\frac{1}{2}b(-b-\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\right)}, \qquad (6)$$

где $C_{-b,\alpha_1}^{s_{1,2,3}}$ — коэффициент, получаемый при слиянии полей, $C(s,\alpha_2,\alpha_3)$ — значение трехточечного коррелятора.

Литература

1. *Belavin A. A., Polyakov A. M., Zamolodchikov A. B.* Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory //Nucl. Phys. B. 1984. V. 241(2). P. 333–380.
2. *Bershadsky M. A., Knizhnik V. G., Teitelman M. G.* Superconformal symmetry in two dimensions // Phys. Lett. B. 1985. V. 151(1). P. 31–36
3. *Dotsenko Vl.S., Fateev V.A.* Conformal algebra and multipoint correlation functions in 2D statistical models // Nucl. Phys. B. 1984. V. 240(3). P. 312–348.

УДК 537.226.4, 538.91, 539.232

Алгебраическая структура БПС состояний

***А. Н. Гавшин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2] Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова НИЦ «Курчатовский институт»

Рассмотрены неподвижные точки на пространстве модулей представлений колчана, отвечающего четырехмерному дивизору на многообразии $\mathbb{C}^3$ и разрешенной конической сингулярности. Изучение спектра состояний БПС представляет особый интерес в колчанных суперсимметрических теориях, где данные состояния обладают примечательной алгебраической структурой, названной алгеброй БПС [1, 2]. В связи с этим, БПС состояния и связанные с ними структуры активно исследуются в различных областях математической и теоретической физики, алгебраической геометрии и теории представлений.

Колчан — это ориентируемый граф. Известно, что колчаны можно использовать для обозначения типа эффективной N=1 суперсимметричной теории Янга–Миллса, возникающей на мировых объемах

D-бран [3]. В рамках работы рассматривается конкретный пример колчана, который отвечает многообразию $\mathbb{C}^3$ (рис. 1).

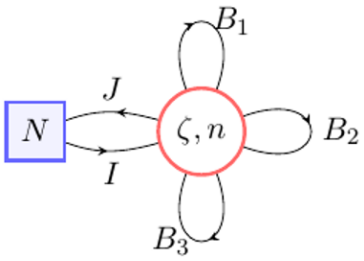


Рис. 1. Базовый колчан

Пространство модулей вакуумов в теории содержит матрицы B_1, B_2, I (B_3 = 0, J = 0), которые должны удовлетворять так называемым ADHM условиям:

$$\begin{gathered}[B_1, B_1'] + [B_2, B_2'] + II' - J'J = \zeta * E \\ [B_1, B_2] + IJ = 0\end{gathered} \tag{1}$$

Данное пространство допускает введение на нем эквивариантного торического действия группы $U(1) \times U(1)$ с двумя параметрами ϵ_1, ϵ_2. Выясняется, что фиксированные точки введенного торического действия на данном пространстве модулей удовлетворяют примечательным уравнениям:

$$\begin{gathered}[\Phi, B_i] = \epsilon_i B_i \\ \Phi I = 0\end{gathered} \tag{2}$$

где Φ — элемент калибровочной алгебры. По структуре данные уравнения напоминают алгебраические соотношения в алгебре Ли. С помощью методов алгебры и теории собственных векторов можно получить, что фиксированные точки данного пространства модулей можно перечислить с помощью диаграмм Юнга.

Алгебра Янгиана содержит три набора операторов, которые принято объединять в три производящие функции $e(z), f(z), \psi(z)$, где z- спектральный параметр. В рамках работы предлагается специальный анзац для элементов операторов, действующих на пространстве фиксированных точек:

$$\begin{gathered}e(z)\langle\lambda\rangle = \sum E_{\lambda,\lambda+a}/z^{n+1}\,\langle\lambda + a\rangle \\ f(z)\langle\lambda\rangle = \sum F_{\lambda,\lambda-a}/z^{n+1}\,\langle\lambda - a\rangle \\ \psi(z)\langle\lambda\rangle = \psi_\lambda(z)\langle\lambda\rangle\end{gathered} \tag{3}$$

Значения введенных коэффициентов $E_{\lambda,\lambda+a}, F_{\lambda,\lambda-a}$ получаются путем рассмотрения касательного пространства в окрестности фиксированных точек и может быть выражено с помощью Эйлеровых характеров:

$$\begin{gathered}E_{\lambda,\lambda+a} = Eul_\lambda / Eul_{\lambda,\lambda+a} \\ F_{\lambda,\lambda-a} = Eul_\lambda / Eul_{\lambda-a,\lambda}\end{gathered} \tag{4}$$

Полученная алгебра удовлетворяет алгебраическим соотношениям Янгиана $\boldsymbol{Y(\hat{gl}_1)}$, а именно:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\psi(z)\psi(w) \sim \psi(w)\psi(z)} \\ \boldsymbol{\psi(z)e(w) \sim \varphi(z-w)e(w)\psi(z)} \\ \boldsymbol{\psi(z)f(w) \sim [\varphi(z-w)]^{-1}f(w)\psi(z)} \\ \boldsymbol{e(z)e(w) \sim \varphi(z-w)e(w)e(z)} \\ \boldsymbol{f(z)f(w) \sim [\varphi(z-w)]^{-1}f(w)f(z)} \\ \boldsymbol{[e(z), f(w)] \sim -1/\sigma_3\,(\psi(z) - \psi(w))/(z-w)}\end{gathered} \tag{5}$$

Данная конструкция имеет множество обобщений, в частности: алгебра Янгиана для произвольного колчана, классификация алгебр Янгианов с помощью колчанов как обобщение диаграмм Дынкина для алгебр Ли. Помимо этого, интерес представляет исследование представления алгебры Янгиана в различных фазах пространства модулей вакуумов.

Литература

1. *Harvey J. A. Moore G. W.* Algebras, BPS states, and strings//Nuclear Physics. 1995. V. 463. P. 315-368.

2. *Harvey J. A., Moore G. W.* On the Algebras of BPS States//Communications in Mathematical Physics. 1996. V. 197. P. 489–519.
3. *Galakhov D. M., Yamazaki M.* Quiver Yangian and Supersymmetric Quantum Mechanics // Communications in Mathematical Physics. 2022. V. 396. P. 713–785.

УДК 514.7

Сюръективные рациональные отображения поверхностей дель Пеццо

А. М. Леконцева

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В статье [1] было начато изучение *сюръективных рациональных отображений (эндоморфизмов) f* проективного пространства P^n в себя и был установлен ряд алгебро-геометрических свойства таких *f* (см. также работы [2], [3], [4]). В настоящем исследовании мы продолжаем эти рассмотрения на случай *алгебраических поверхностей.*

А именно, пусть X есть гладкая проективная поверхность над полем комплексных чисел, $f : X \dashrightarrow X$ -- сюръективный (необязательно регулярный) рациональный эндоморфизм *X.* Другими словами, мы предполагаем, что существует *сюръективный морфизм* $f : X \setminus Z \longrightarrow X$, где $Z < X$ -- конечное множество точек. Пусть также deg *f* есть топологическая степень *f* (т.е. число точек в общем слое *f*). Тогда базовый вопрос, который мы изучаем, таков: когда существует пара (*X, f*) с deg $f > 1$?

Мы даем исчерпывающий ответ в случае поверхностей дель Пеццо:

Теорема (см. [5]). Пусть *X* и *f* — такие же, как выше, и кроме того антиканонический дивизор $-K_x$ обилен. Тогда deg $f > 1$ если и только если антиканоническая степень $(-K_x)^2 > 5$.

Замечание. Напомним, что условие $(-K_x)^2 > 5$ эквивалентно тому, что поверхность *X торическая.* Отсюда имеется множество регулярных эндоморфизмов (Фробениуса) у таких X. В то же время, если $X = P^2$, то существует *нерегулярое сюръективное f* (см. Пример 1.6 в [1]). Интересно найти подобные отображения для остальных торических дель Пеццо.

Напомним, что **Теорема** была доказана в [6] в предположении, что *f регулярно.* Однако рассуждения в этой работе не обобщаются непосредственно на наш, нерегулярный, случай. Именно, доказательство Предложения 4 в [6] существенно основывается на формуле ветвления $K_x = f^*(K_x) + R$, а также на формуле проекции $f_* f^* = (\deg f) Id$ для операторов f^* и f_*, действующих на группе Нерона-Севери $N^1(X)$. И хотя в общем случае имеется аналог формулы $K_x = f^*(K_x) + R$, при $X = P^2$, нет никакой возможности корректно определить f_*. Однако все же есть аватар оператора f^* на $N^1(X)$ для любого сюръективного рационального отображения *f.* Это позволяет применить рассуждения из [7].

Именно, после замены *f* на итерацию *f o* ... o *f* можно считать, что f^* сохраняет экстремальные лучи R_i *рационального полиэдрального* конуса Мори NE(X). Тогда рассмотрения сводятся к случаю $(-K_x)^2 = 5$ (как в Лемме 6.2 в [7]). Имеем R_i = луч, порожденный классом $[E_i]$, для (-1)-кривых $E_i < X$. Эти E_i являются на самом деле десятью прямыми относительно антиканонического вложения *X* в P^5. Кроме них на *X* есть 5 пучков коник.

Эти пучки определяют 5 морфизмов $p_j : X \longrightarrow P^1$ со связными слоями. Также p_j соответствуют некоторым граням конуса NE(X). (Напомним, что существует бирациональное стягивание $s: X \longrightarrow P^2$ четырех непересекающихся E_j. Пусть это $E_1, \dots, E_4$. Тогда классы коник на X есть $s^*(l) - E_j$ и $s^*(l) - E_1 - \dots - E_4$) для прямой $l < P^2$). Далее, так как $f^*(R_i) = R_i$ для всех i по предположению, мы получаем $p_j \, o \, f = h_j \, o \, p_j$ для некоторых $h_j : P^1 \longrightarrow P^1$. Более того, следуя доказательству Леммы 6.3 в [7], мы показываем, что прообраз $h_j^{-1}(D_j)$ множества критических значений p_j снова лежит в D_j.

Наконец, используя равенство $-2K_X = E_1 + \dots + E_{10}$, мы находим, что *f* задает *int-amplified* эндоморфизм базы $P^1 = p_{j0}(X)$ для некоторого j_0. Последнее, как следует из доказательства Предложения 6.4 в [7], невозможно.

Литература

1. *Karzhemanov I., Zhdanovskiy I.* Some properties of surjective rational maps // Eur. J. Math. 2018. V. 4. P. 326–329.
2. *Karzhemanov I.* Maximum Likelihood Degree of Surjective Rational Maps // Arnold Math. J. 2022. V. 8. P. 513–516.
3. *Karzhemanov I.* Projective-Geometric Aspects of Quantization // Lobachevskii J. Math. 2022. V. 43 (7). P. 1651–1654.

4. *Kulikov A., Zhdanovskiy I.* On Surjective Quadratic Maps of P2 // Lobachevskii J. Math. 2023. V. 44 (6). P. 2072–2078.
5. *Karzhemanov I., Lekontseva A.* Surjective rational maps and del Pezzo surfaces // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2311.01835. 2023.
6. *Beauville A.* Endomorphisms of hypersurfaces and other manifolds // Inter- nat. Math. Res. Notices. 2021. V. 1. P. 53–58.
7. *Totaro B.* Endomorphisms of Fano 3-folds and log Bott vanishing // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2305.18660. 2023.

УДК авторами не указан

Непрерывный предел неоднородной шестивершинной модели и интегрируемые системы в конформной теории поля

***И. И. Гусев*[1,2], *А. В. Литвинов*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

Модель спиновой цепи XXZ Гейзенберга была тщательно изучена. Его гамильтониан имеет вид

$$\widehat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right)$$

Наиболее интересным с точки зрения демонстрируемых физических свойств является частный случай, когда спиновая цепочка находится в критическом режиме, а ее поведение в скейлинговом пределе определяется конформной теорией поля безмассового гауссова поля. Этот случай соответствует шестивершинной модели, где набор локальных весов Больцмана одинаков в каждом узле решетки. В последние годы достигнут значительный прогресс в точном вычислении различных интересных величин спиновой цепочки Гейзенберга и более общей спиновой цепочки XXZ с Zr симметрией. Развитие математического аппарата 2D CFT привело к возможности обобщить имеющиеся знания на случай неоднородной 6-вершинной модели, описанной в статьях [1] и [2], и стало понятно, где залегают корни естественно возникшего уравнения анзаца Бете.

Параллельно с этим BLZ подходом был разработан другой, основанный на аффинной янгианной симметрии. В теорию CFT с sl(n) симметрией можно добавить вспомогательное невзаимодействующее бозонное поле [2]. Результатом станет действие

$$S = \int \left(\frac{1}{8\pi}\left(\partial_\mu \phi \cdot \partial_\mu \phi\right) + \Lambda \sum_{k=1}^{n-1} e^{b(\phi_{k+1}-\phi_k)} + \Lambda e^{b(\phi_1-\phi_n)}\right) d^2x$$

где последний член соответствует аффинному корню sl(n) и приводит к интегрируемому возмущению.

В настоящее время неизвестно, как связаны эти два подхода. Например, трансфер-матрицы отличаются, и спектр описывается совершенно разными уравнениями. В этой работе делается попытка объединить эти два подхода и сравнить их, изучая спиновые цепочки и лежащие в их основе теории поля, на примере 6-вершинной модели.

Мы исследовали интегрируемую CFT, описывающую масштабный предел спиновой цепочки XXZ с симметрией Zr. Результатом стало описание моделей спиновых цепочек с r = 1, 2, 3. Были найдены основные и низкоэнергетические возбужденные состояния, построен спектр гамильтоновой модели и найдены собственные значения оператора отражения. Для определения состояний модели методом BLZ необходимо найти корни анзаца Бете:

$$\prod_{j=1}^{N} \frac{\eta_J + q\zeta_m}{\eta_J + q^{-1}\zeta_m} = -e^{2\pi i k} q^{2S^z} \prod_{j=1}^{M} \frac{\zeta_j - q^2\zeta_m}{\zeta_j - q^{-2}\zeta_m}, \qquad m = 1,2,\dots,M, \quad S^z = \frac{1}{2}N - M \geq 0.$$

Их вид имеет структуру, как на рис. 1. При этом энергия состояния модели описывается асимптотически с ростом длины цепочки N. Низколежащие уровни энергий выстраиваются в конформную башню.

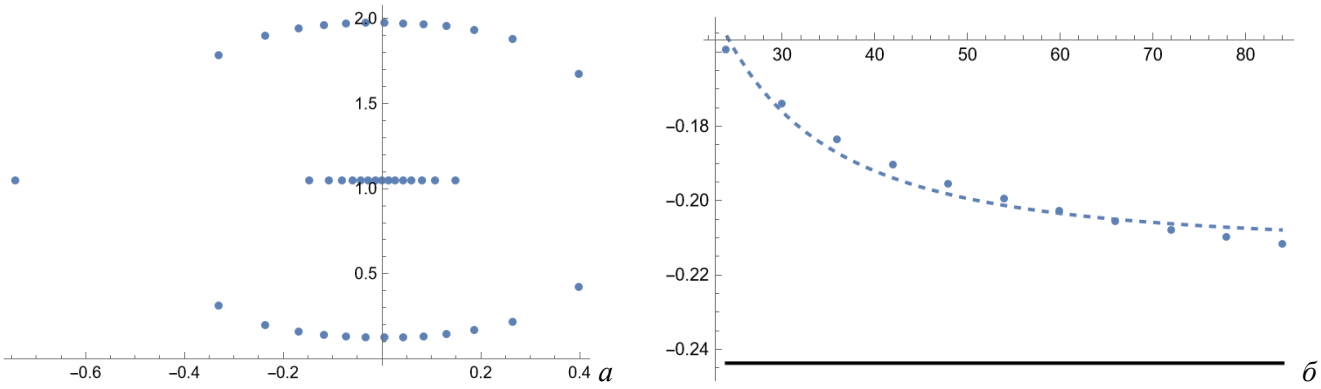


Рис. 1. Основное состояние для шестивершинной модели с Z3 симметрией (*а*). Решение уравнения Бете анзаца для этого состояния для длины цепочки N = 84 (*б*). Скейлинг энергии основного состояния к нижнему уровню алгебры Вирасоро

Литература

1. *Bazhanov V. V., Lukyanov S. L., Zamolodchikov A. B.* Higher-level eigenvalues of q-operators and schrodinger equation // Adv. Theor. Math. Phys. 2003. V. 7: 4. DOI: 10.4310/ATMP.2003.v7.n4.a4.
2. *Bazhanov V. V.* [et al.]. Some algebraic aspects of the inhomogeneous six-vertex model // SIGMA. 2021. V. 17: 025. DOI: 10.3842/SIGMA.2021.025.
3. *Litvinov A. V., Vilkoviskiy I.* Liouville reflection operator, affine yangian and bethe ansatz // J. High Energy Phys. 2020. V. 2000: 100. DOI: 10.1007/JHEP12(2020)100.

УДК 515.12, 515.14

Исследование минимальных структур симплициального комплекса на расслоениях со слоем S^1

Н. С. Белоконев

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Расслоения над топологическими пространствами почти всю историю развития топологии вызывали заслуженный интерес у научного сообщества. Возможно, самый простой и общепринятый способ их исследовать — характеристические классы. В нашей работе мы задались вопросом, какие условия ставятся на расслоение над данным пространством (для определенности, ограничимся замкнутыми ориентируемыми поверхностями), чтобы на нем можно было задать структуру симплициального комплекса (триангуляцию) одновременно с базой, так, чтобы они были согласованы. Мы получили некоторые интересные результаты со слоем S^1 и сейчас занимаемся обобщением результатов на слой T^k.

Важный момент, позволяющий использовать характеристические классы в работе с такими слоями, это соответствие главных расслоений (слой $T^k \cong S^1 \times \ldots \times S^1 \cong U(1) \times \cdots \times U(1)$) и ассоциированных с ними комплексных векторных расслоений (сумма Уитни $\mathbb{C} \oplus \ldots \oplus \mathbb{C}$). Для них определены классы Чженя — характеристические классы когомологий, которые мы использовали в своей работе.

Чтобы исследовать классы Чженя триангуляции (со слоем S^1) над базой B, удобно представить слой над каждым симплексом, как последовательность симплексов, составляющих его. Для этого используется представление каждого слоя в виде *ожерелья* — циклического слова, функтором из категории симплексов комплекса **B** в категорию циклических слов, буквы в которых символизируют тот или иной многомерный симплекс, пересекающий слой. Пример ожерелья над одномерным симплексом продемонстрирован на рис. 1.

Пусть хорошие подслова — подслова длины k+1 из разных букв, четность которых определяется знаком перестановки алфавита. Обозначим символами N_o и N_e соответственно число нечетных и четных хороших подслов.

Сопоставим каждому ожерелью над алфавитом мощности k+1 его четность:

$$P(w) = \frac{N_e - N_o}{N_e + N_o}.$$

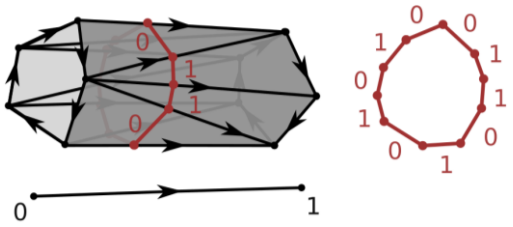


Рис. 1. Ожерелье над одномерным симплексом. Граничные операторы переводят слово в 00000 и 11111

С использованием таких последовательностей в [1] было доказано, что локальное значение коцепи, представляющей 1 класс Чженя для двумерных симплексов, можно выразить в комбинаторном виде:

$$C_1(t) = \frac{1}{2}P\big(w(t)\big).$$

Сразу можно видеть, что число Чженя–Эйлера триангулированного расслоения $\mathcal{E}$ должно удовлетворять соотношению $2|\mathcal{E}| < F$, где F — число 2-симплексов в триангуляции B. В работе [2] было показано, что при $4|\mathcal{E}| \leq F$ триангуляция возможна всегда, а в случае для S^2, если для данной триангуляции базы существует подкомплекс, удовлетворяющий определенным свойствам, то данное условие необходимо. В нашей работе мы обобщили это утверждение на случай произвольной замкнутой ориентируемой поверхности, а для $B = S^2$ удалось показать, используя результаты [3], что выполняется условие $3|\mathcal{E}| \leq F$.

Дальнейшие исследования в этом направлении сопряжены с работой над слоем T^k и выводом некоего аналога комбинаторной формулы для этого случая.

Литература

1. *Mnev N., Sharygin G.* On local combinatorial formulas for Chern classes of triangulated circle bundle // arXiv preprint. [2016]. arXiv: 1608.04708.
2. *Panina G., Turevskii M.* Minimal triangulations of circle bundles // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2311.04214.
3. *Călinescu G.* [et al.] A Better Approximation Algorithm for Finding Planar Subgraphs // Journal of Algorithms. 1998. V. 27(2). P. 269–302.

УДК 530.1

N=2 суперсимметричные теории высших спинов: компонентная структура

***А. Л. Нурышева*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединенный институт ядерных исследований

В настоящее время суперсимметричные теории интересуют людей по двум причинам. Первая — это суперсимметризовать теорию высших спинов для бозонов. Как известно поля в теории высших спинов безмассовые, поэтому вторая — построить переход к теории суперструн при высоких энергиях и маленьких расстояниях, найти математический механизм, который стоит за появлением у струн масс [1].

В данной работе будет рассматриваться гармоническое пространство с базисом, дополненным грассмановыми переменными, выписан лагранжиан для спинов s = 1, s = 2, s = 3, с помощью бозонных и фермионных полей. Особый интерес представляет случай s = 3, который не был подробно рассмотрен ранее. Также будет осуществлен переход к грассмановым переменным, посчитано действие с использованием гармонических производных, найдена вариация и проверена калибровочная инвариантность.

Хотелось бы иметь способ вывода инвариантных лагранжианов. Для N = 1 лагранжиан со взаимодействием, перенормируемый относительно суперсимметрии, был назван в честь первооткрывателей моделью Весса–Зумино [2]:

$$L = \partial_m\varphi\partial^m\overline{\varphi} - \frac{i}{4}\psi^\alpha(\sigma^m)_{\alpha\dot{\alpha}}\partial_m\overline{\psi}^{\dot{\alpha}} - \partial_m\psi^\alpha(\sigma^m)_{\alpha\dot{\alpha}}\overline{\psi}^{\dot{\alpha}} + F\overline{F} + m(\varphi F - \frac{1}{4}\psi\psi) + g(\varphi^2 F - \frac{1}{2}\varphi\psi\psi) + \text{с. с.} \quad (1)$$

Этот лагранжиан так же можно получить из инвариантного суперполевого действия киральных суперполей. Мы раскладываем суперполе и интегрируем по грассмановой переменной, что было на данный момент мной проделано.

$$\widetilde{S} = \int d^4\mathrm{x}\mathrm{d}^4\theta K\phi(x_L,\theta),\overline{\phi}\left(x_R,\overline{\theta}\right) + \int d^4x_L d^2\theta\left(\frac{g}{3}\phi^3 + \frac{m}{2}\phi^2\right) \quad (2)$$

Планируется обобщить механизм для N = 2 и найти суперсимметричное действие для s = 1. Потом рассмотреть компонентную структуру суперполя, выраженного через бозонные и фермионные поля.

Литература

1. *Buchbinder I., Ivanov. E., Zaigraev N.* Unconstrained off-shell superfield formulation of 4D, N=2 supersymmetric higher spins // arXiv preprint. [2021]. arXiv: 2109.07639.
2. *Galperin A. S., Ivanov E. A.* [et al.]. Harmonic superspace // Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press. 2001. V. 1. P. 38–43.

УДК 530.1

О массовом спектре мезонов в двумерных квантовых теориях поля на примере модели 'т Хоофта

***А. В. Литвинов*[1,2], *П. А. Мещеряков*[1,2,3]**

[1]Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН
[2]Сколковский институт науки и технологий
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Проблема конфайнмента кварков является одной из нерешенных задач тысячелетия. Есть надежда, что изучение механизмов конфайнмента в низкоразмерных (двумерных) теориях поля может приблизить человечество к осознанию случая размерности $D = 3 + 1$.

Если двумерная квантовая теория с действием S_0 обладает двукратно вырожденным вакуумом (как правило это случается, если теория невозмущенная), то существуют нетривиальные решения — солитоны, устроенные таким образом, что на разных пространственных бесконечностях они переходят в разные вакуумные состояния. Если же теорию возмутить, то есть добавить к действию слагаемое gS_1 (g — константа связи), то вырождение вакуума, как правило, снимается и солитоны (которые принято называть *кварками*) теперь не могут существовать по отдельности, так как отдельно взятый солитон обладает теперь бесконечно большой энергией. Однако допустимы решения в виде пары солитон-антисолитон (которые принято называть *мезонами* или бризерами). Другими словами: асимптотически свободные кварки ненаблюдаемы, в теории присутствуют только связанные состояния - мезоны.

Одним из примеров описанных выше теорий, является 2D модель ‘т Хоофта [1], представляющую из себя модель КХД с большим числом цветов. Спектр масс мезонов в данной модели, построенных из двух кварков с голыми массами m_1 и m_2, определяется уравнением Бете-Салпитера:

$$2\pi^2\lambda\,\varphi(x) = \left[\frac{\alpha_1}{x} + \frac{\alpha_2}{1-x}\right]\varphi(x) - P.V.\int_0^1 \mathrm{d}y\,\frac{\varphi(y)}{(y-x)^2}, \quad (1)$$

где

$$\alpha_1 = \frac{\pi m_1^2}{g^2} - 1,\ \ \alpha_2 = \frac{\pi m_2^2}{g^2} - 1,$$

с g - константой связи ‘т Хоофта. Функция $\varphi(x)$ должна удовлетворять граничным условиям:

$$\varphi(0) = \varphi(1) = 0.$$

Уравнение (1) определяет спектральную задачу для параметра λ: собственные значения λ_n, $\mathrm{n} = 0,\ 1,\ 2, \ldots$, являются дискретными и определяют массы мезонов,

$$M_n^2 = 2\pi g^2\lambda_n.$$

В работе Фатеева, Лукьянова и Замолодчикова [2], подробно исследуется частный случай $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ в пределе низких и больших энергий. Также, без доказательства приводятся некоторые результаты для случая $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha \neq 0$. Мы пытаемся воспроизвести результаты последнего случая, а также получить новые ответы. Особенно интересно исследовать аналитическую зависимость спектров от параметра α, поскольку при тех значениях параметра α_{cr}, когда возникает нулевая масса в спектре

$M_n^2(\alpha_{cr}) = 0$, теория может обладать интересной физикой. Более конкретно, вероятно, таким точкам можно сопоставить в соответствие некоторые (неунитарные) конформные теории поля.

Литература

1. *Hooft G.'t.* A two-dimensional model for mesons // Nuclear Physics B. 1974. V. 75(3). P. 461–470
2. *Fateev V. A*. [et al.]. On mass spectrum in 't Hooft's 2D model of mesons // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. V. 42: 304012.

УДК 519.218.5, 517.98

Скорость сходимости в центральной предельной теореме для аддитивных функционалов в точечном процессе с ядром Бесселя

С. М. Горбунов

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Рассмотрим следующее ядро для $x, y > 0$:

$$K(x,y) = \int_0^1 t\sqrt{xy}J_\nu(xt)J_\nu(yt)dt, \quad (1)$$

где J_ν — функция Бесселя порядка ν, который мы будем полагать неотрицательным. Ядро (1) определяет проектор на пространстве $L_2(\mathbb{R}_+)$, который мы так же обозначим K. Для функции $f \in L_1(\mathbb{R}_+) \cap L_\infty(\mathbb{R}_+)$ определим оператор B_f как интегральный оператор на $L_2(\mathbb{R}_+)$ с ядром

$$B_f(x,y) = \int_0^\infty t\sqrt{xy}J_\nu(xt)J_\nu(yt)f(t)dt.$$

Будем также полагать $B_1 = I$. Введем следующую полунорму для функций на положительной полуоси:

$$\|f\|_{\dot{\mathcal{B}}} = \|f\|_{\dot{H}_1} + \|f\|_{\dot{H}_3} + \|xf(x)\|_{\dot{H}_2} + \|x^2 f(x)\|_{\dot{H}_3},$$

где $\dot{H}_p$ — соболевская полунорма, равная L_2 — норме производной порядка p. Введем следующее обозначение:

$$L(b) = \left(1 + \|xf'(x)\|^2_{L_\infty} + \|f\|^2_{\dot{\mathcal{B}}}\right)\|f\|_{\dot{\mathcal{B}}}.$$

Для функции $f \in L_\infty(X)$ оператор поточечного умножения на нее будем обозначать таким же символом. Для любого подмножества A его индикаторную функцию обозначим χ_A. Напомним, что для $f \in L_\infty(\mathbb{R})$ оператор Винера-Хопфа W_f определяется как проекция свертки с f на положительную полуось. Наконец, для функции $f \in H_1(\mathbb{R}_+)$ положим $f_\pm$ — разложение ее четного продолжения в положительные и отрицательные частоты. В таких обозначениях наш результат формулируется следующим образом.

Теорема. Пусть $f \in L_1(\mathbb{R}_+) \cap L_2(\mathbb{R}_+)$ и $L(f) < +\infty$. Тогда верна следующая формула:

$$\det\left(I + \left(e^f - 1\right)K\right) = \exp\left(\frac{1}{\pi}\int_0^\infty f(x)dx - \frac{\nu}{2}f(0) + \frac{1}{2}\int_0^\infty x\hat{f}^2(x)dx\right)Q(f), \quad (2)$$

где

$$Q(f) = \det\left(\chi_{[1,\infty)}W_{e^{f-}}B_{e^{-f}}W_{e^{f+}}\chi_{[1,\infty)}\right).$$

Также существует константа C такая, что для любой функции f, удовлетворяющей условиям выше выполнена следующая оценка

$$|Q(f) - 1| \le \mathrm{C}\,L(f)\exp\left(4\|f_+\|_{L_\infty}\right)\exp\left(C\,exp\left(4\|f_+\|_{L_\infty}\right)L(f)\right).$$

Приведем вероятностную интерпретацию данной теоремы. Конфигурацией на $\mathbb{R}_+$ называется счетное подмножество без точек накопления. Для произвольной функции f мультипликативные и

аддитивные функционалы — это функции на конфигурациях, определяемые следующими формулами соответственно

$$S_f(X) = \sum_{x\in X} f(x), \Psi_{1+f}(X) = \prod_{x\in X}(1+f(x)).$$

Ядро (1) определяет меру $\mathbb{P}_K$ на конфигурациях на $\mathbb{R}_+$ с некоторой σ-алгеброй, конструкцию которой мы опустим. Для любой функции $f \in L_\infty(\mathbb{R}_+)$ с компактным носителем, верно следующее, полностью характеризующее эту меру, выражение для математического ожидания мультипликативных функционалов

$$\mathbb{E}_K \Psi_{1+f} = \det(I + fK). \quad (3)$$

Эта мера называется детерминантным точечным процессом с ядром Бесселя [2]. Она возникает, например, как скейлинговый предел распределений собственных чисел случайных положительных $N \times N$ матриц с мерой $Z^{-1}(\det M)^{\frac{\nu}{2}} \exp\left(-\mathrm{tr}\frac{M}{2}\right)\, dM$ относительно меры Лебега dM при скейлинге $\lambda \to \lambda/4N$. Также ее можно получить скейлинговым пределом ортогонального полиномиального ансамбля Якоби.

Центральная предельная теорема описывает распределение аддитивных функционалов $S_f{}^R = S_{f(x/R)}$ при $R \to \infty$. Выражение (3) можно по непрерывности продолжить до более широкого класса функций. Несложно видеть, что тогда формула (2), примененная к $\lambda f(x/R)$, дает преобразование Лапласа $S_f{}^R$. Асимптотическое выражение при $R \to \infty$ для определителя в формуле (2) было получено Басор и Эрхардтом в [1]. Главное следствие их результата — это сходимость $S_f{}^R - \mathbb{E}_K S_f{}^R$ по распределению к нормальному. Формула (2) же дает точное значение сходящегося к 1 множителя $Q(f)$ и позволяет оценить скорость этой сходимости: $L(b(x/R)) \le \frac{1}{\sqrt{R}} L(b)$.

Следствие. Пусть f — действительнозначная функция, удовлетворяющая условиям теоремы выше. Положим также $\int_0^\infty x\hat{f}^2(x)dx = 1$. Обозначим $F_{R,f}$ функцию распределения $S_f{}^R - \mathbb{E}_K S_f{}^R$, $F_{\mathcal{N}}$ стандартную гауссову функцию распределения. Тогда существует константа C, зависящая только от $L(f)$, $\|f_+\|_{L_\infty}$, такая, что выполнена следующая оценка на расстояние Колмогорова–Смирнова

$$\sup_x \left| \quad_{R,f}(x) - F_{\mathcal{N}}(x) \right| \le \frac{C}{\ln R}.$$

Отметим, что асимптотика Басор и Эрхардта является аналогом теоремы Каца–Ахиезера, дающей аналогичную асимптотику для определителей операторов Винера–Хопфа. Формула Каца и Ахиезера же в свою очередь является непрерывным аналогом второй теоремы Сеге, формулировка которой заключается в аналогичной асимптотике для Теплицевых определителей. Точная формула для последних была получена Бородиным и Окуньковым в 2000 году, для определителей Фредгольма операторов Винера–Хопфа — Басор и Ченом в 2003. Результат Басор и Чена позволяет найти скорость сходимости в центральной предельной теореме для синус-процесса. Обзор этих результатов приведен, например в [3].

Литература

1. *Basor E. L., Ehrhardt T.* Asymptotics of Determinants of Bessel operators // Comm. Math. Phys. 2003. V. 234(3). P. 491–516.
2. *Tracy C. A., Widom H.* Level spacing distributions and the Bessel kernel // Comm. Math. Phys. 1994. V. 161(2). P. 289-309.
3. *Böttcher A., Silbermann B.* Analysis of Toeplitz operators. — Heidelberg: Springer Berlin, 2006.

Секция физики квантовых технологий

Председатель: Г. В. Шляпников (д. ф.-м. н., зав. кафедрой)

Зам. председателя: А. К. Федоров (к. ф.-м. н., профессор)

Секретарь: А. С. Мастюкова

Дата: 01.04.2024 Время: 10:00

УДК 53.082.5

Моделирование измерения отправляемого состояния в протоколе КРК BB-84 с пассивным приготовлением

А. А. Двуреченский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В настоящий момент системы квантового распределения ключей уже успешно вышли на коммерческий рынок как готовый продукт для получения абсолютно секретной информации. Однако их внушительные размеры, высокое тепловыделение и дороговизна компонентов не позволяют им получить широкое распространение.

Одним из вариантов решения данных проблем является идея приготовления состояний в пассивном режиме, описанная в статье [1]. Данный способ приготовления состояний позволяет не использовать фазовые модуляторы. Также применение протокола без состояний-ловушек («decoy state») позволяет избавиться от модуляторов интенсивности, тем самым максимально упростив конструкцию отправителя. Однако необходимо принять во внимание, что данный протокол оправдано использовать при расстояниях между передающим и принимающим устройствами не более 40 км. Как видно из рис. 1, если проводить сеансы распределения ключей внутри большинства городов (расстояния до 30 км), данный протокол предпочтительнее протоколу с состояниям-ловушками.

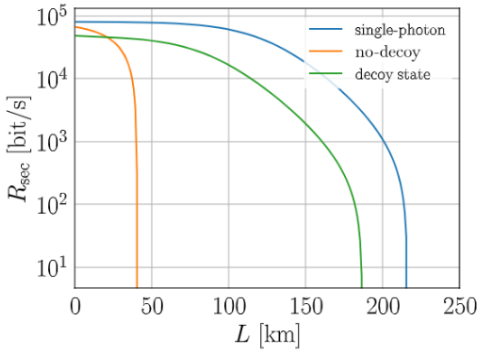


Рис. 1. Скорость секретного ключа от расстояния с параметрами, соответствующим установкам, производимыми ООО «QRate». “*Single-photon*” — случай с идеальным однофотонным источником, “*Decoy-state*” — использование ослабленных когерентных импульсов и протокола с состояниями-ловушками, “*No-decoy*” — использование ослабленных когерентных импульсов и протокола без состояний-ловушек

Пример схемы для пассивного приготовления таких состояний приведен на рис. 2.

На этапе генерации состояний из лазера вылетают импульсы со случайной фазой, после чего первый импульс сбивается со вторым на выходе интерферометра Маха-Цендера. Таким образом на данном этапе отправитель не знает о том, какое состояние он приготовил. Для его измерения необходимо использовать быстрый импульсный поляриметр (SOP analyser).

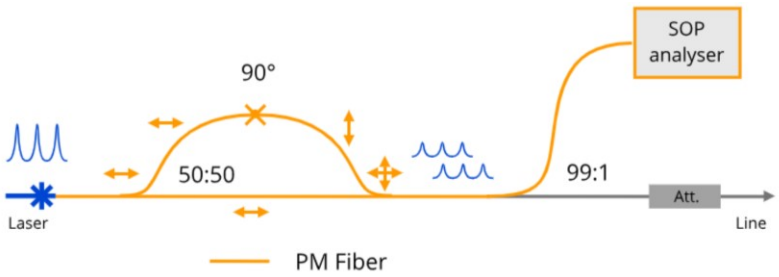


Рис. 2. Схема для пассивного приготовления состояний с использованием одного лазерного источника. Разработка ООО «QRate»

Было произведено моделирование работы импульсного поляриметра с учетом реальных импульсов лазера. Для описания импульсов лазеров использовались скоростные уравнения из [2].

Литература

4. *Curty M.* [et. al.]. Passive sources for Bennett-Brassard 1984 quantum-key-distribution protocol with practical signals // Physical Review A. 2010. T. 82(5): 052325.
5. *Шаховой Р. А.* Динамика полупроводниковых лазеров — М.: Лань, 2024.

УДК 538.945

Анализ квантовых вычислительных ресурсов при реализации квантовых алгоритмов на многомерных системах

А. С. Чудаков

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Целью настоящей работы является анализ квантовых вычислительных ресурсов при реализации таких важных алгоритмов, как квантовое преобразование Фурье и алгоритм Гровера на кудитных системах. В ходе работы было проведено моделирование алгоритма QFT на многомерных системах с размерностью d от 2 до 8 в процессе преобразования вектора размерностью 1024, а также алгоритма Гровера. После чего было проведено количественное сравнение однокудитных и двухкудитных гейтов в зависимости от размерности кудита d и построены гистограммы. В дальнейшем планируется провести анализ при наложении шума.

Рассмотрим алгоритм квантового преобразования Фурье в случае кубитов. В этом случае преобразование состояния под действием оператора QFT можно представить формулой ниже:

$$|j\rangle \xrightarrow{QFT} \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{\frac{2\pi i j k}{2^n}} |k\rangle \ . \qquad (1)$$

Таким образом, на рис. 1 показана схема алгоритма QFT для системы на кубитах.

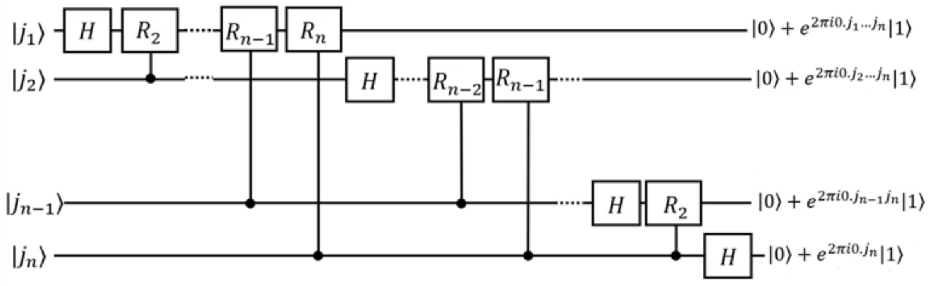


Рис. 1. Схема алгоритма квантового преобразования Фурье в случае кубитной системы

Далее рассмотрим алгоритм квантового преобразования Фурье в случае кудитов размерности d [1]. В этом случае действие оператора QFT можно представить формулой ниже:

$$|j\rangle \xrightarrow{QFT} \frac{1}{d^{\frac{n}{2}}} \sum_{k=0}^{d^n-1} e^{\frac{2\pi i j k}{d^n}} |k\rangle. \quad (2)$$

Важно, что при реализации QFT используется операция R_k^d, которая является обобщением гейта R_k на случай кудита размерности d. Таким образом, на рис. 2 показан алгоритм QFT для системы кудитов.

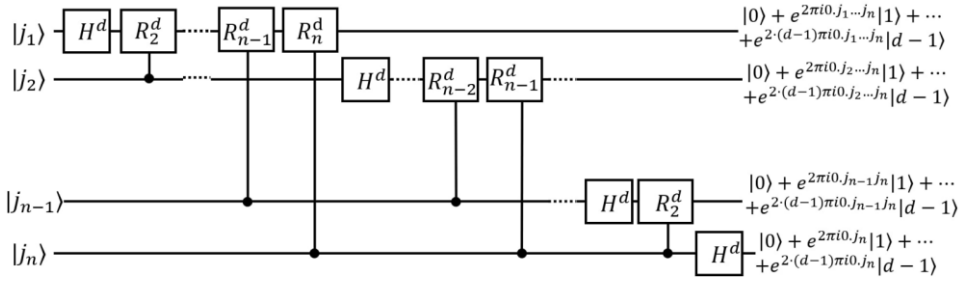


Рис. 2. Схема алгоритма квантового преобразования Фурье в случае кудитной системы

Теперь рассмотрим квантовый алгоритм поиска в неструктурированной базе данных, то есть алгоритм Гровера в случае кубитов. Одной принципиально важной его частью является оракул, который представляет собой некоторый черный ящик, способный распознавать решение задачи. Если фаза ансциллы изменила свой знак, то было найдено решение. Действие оракула можно представить в виде:

$$|x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \xrightarrow{O} (-1)^{f(x)} |x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right). \quad (3)$$

Также не менее важной частью является оператор диффузии D, выполняющий поворот состояния вокруг среднего. Таким образом, схему полного алгоритма вы можете видеть на рис.3.

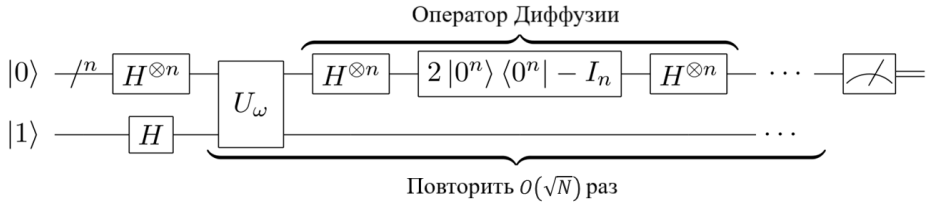


Рис. 3. Схема алгоритма Гровера в случае кубитной системы

Теперь рассмотрим алгоритм Гровера при использовании многомерных квантовых систем [2]. Этот случай интересен тем, что при реализации кудитного алгоритма есть возможность значительно сократить количество производимых операций, что в дальнейшем будет показано. Интересно, что при этом мы имеем аналогичные элементы алгоритма, только на этот раз обобщенные на кудитный случай. Оракул при этом имеет следующий вид:

$$|x\rangle|d-1\rangle \xrightarrow{O} (-1)^{f(x)}|0\rangle|d-1\rangle, \quad (4)$$

где F_d — обобщение оператора Адамара на случай кудита размерности d.

Также данный алгоритм содержит оператор Диффузии D_d, который тоже является обобщением кубитного гейта D. После чего можно построить квантовую схему для данного алгоритма. Она будет иметь вид, представленный на рис. 4.

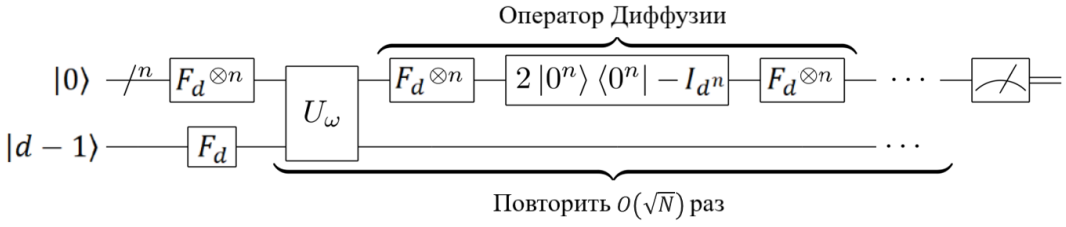


Рис. 4. Схема алгоритма Гровера в случае кудитной системы

Далее вернемся к обсуждению алгоритма QFT. При процессе моделирования был реализован алгоритм на кудитных системах с размерностью d от 2 до 8 для преобразования входного вектора состояния размерностью 1024. Затем было проведено количественное сравнение однокудитных и двухкудитных операций в зависимости от размерности кудита d. После чего были построены гистограммы, которые представлены на рис.5.

Для кудитного алгоритма Гровера планируется провести похожий сравнительный анализ. На данный момент он находится на стадии разработки, как и применение модели шума для обоих алгоритмов.

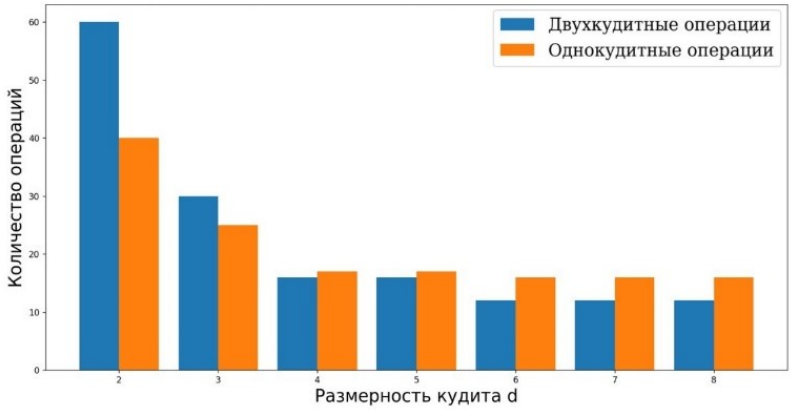


Рис. 5. Графики зависимости количества однокудитных и двухкудитных операций от размерности кудита d при преобразовании вектора состояния размерности 1024 при реализации алгоритма QFT

Литература

1. *Wang Y.* [et al.]. Qudits and high-dimensional quantum computing // Front. Phys. 2020. V. 8: 589504.
2. *Amit S.* [et al.]. Asymptotically Improved Grover's Algorithm in Any Dimensional Quantum System with Novel Decomposed n-qudit Toffoli Gate // Phys. Rev. A. 2022. V. 105: 062453.

УДК 04.056.55

Влияние обратных вспышек в лавинном фотодетекторе на протокол квантового распределения ключей

А. А. Реутов[1,2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ООО «КуРэйт»

Обратная вспышка возникает лавинном фотодетекторе (ЛФД) из-за лавины носителей, которые появляются при поглощении фотона и когда напряжение смещения устройства превышает его напряжение пробоя. Этот свет пропадает вместе с самой лавиной, когда напряжение смещение в детекторе падает ниже напряжения пробоя [1].

Квантовое состояние фотонов обратной вспышки может не коррелировать с состоянием фотона, вызвавшего данный эффект. Однако, с точки зрения безопасности квантового распределения ключей (КРК), фотоны обратной вспышки могут проходить через другие критические для безопасности компоненты приемника и переносить информацию о состоянии этих компонентов обратно в канал [2]. С помощью оптического циркулятора злоумышленник может проникнуть в оптический канал связи и пассивно зафиксировать вторичные фотоны, повторно излучаемые детектором на стороне приемника (называемый также в литературе Бобом).

Вероятность обратной вспышки p_{bf} зависит от параметров ЛФД: материала полупроводниковой структуры, температуры, ширины строба, квантовой эффективности, времени прихода импульса. Обычно оно имеет порядок $10^{-2}-10^{-3}$ и может быть определено экспериментально как:

$$p_{bf} = \frac{m_{bf}}{m_{sig}\eta_{bf}t_{bf}},$$

где m_{sig} — общее количество импульсов, обнаруженных ЛФД Боба; m_{bf} — общее количество отсчетов обратных вспышек, обнаруженных детектором мониторинга с квантовой эффективностью η_{bf}; t_{bf} — потери в канале между ЛФД Боба и детектором мониторинга.

Основная идея нашей работы состоит в том, чтобы включить вероятность обратной вспышки в нижнюю границу измеренных статистических величин. В представленном подходе все излучаемые из приемника в квантовый канал фотоны рассматриваются как полностью компрометирующие соответствующие импульсы, отправленные передатчиком. При наличие обратной вспышки импульс передатчика «помечается» и к нему применяется подход, аналогичный предложенному в работе [3].

Мы модифицируем вариацию протокола КРК BB84 на основе обманных состояний [4]. В ходе измерений в протоколе определяются следующие экспериментально измеримые величины.

$M_{\alpha Z}$ — количество кликов, полученных Бобом при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ и с выбранным базисом Z на стороне приемника (называемой также Алисой).

$M_{\alpha X}$ — количество кликов, полученных Бобом при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ и с выбранным базисом X у Алисы.

$\bar{M}_{\alpha Z}$ — количество ошибочных кликов, полученных Бобом при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ и с выбранным базисом X у Алисы.

$N_{\alpha Z}$ — количество импульсов, излучаемых Алисой при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ с выбранным Алисой базисом Z.

$N_{\alpha X}$ — количество импульсов, излучаемых Алисой при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ с выбранным Алисой базисом X.

$p_{\mathrm{bf},\alpha}$ — вероятность обратной вспышки ЛФД после клика на детекторе Боба, вызванной импульсами с заданной интенсивностью $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$.

В протоколе подразумевается применимость центральной предельной теоремы к вероятности клика $Q_{\alpha Z(X)} = M_{\alpha Z(X)}/N_{\alpha Z(X)}$ при выборе базиса $Z(X)$ у Алисы и при выборе интенсивности $\alpha \in \{\mu, \nu_1, \nu_2\}$ [4]. Также используется доверительный интервал Вальда для оценки математического ожидания и этот интервал дает нижнюю и верхнюю оценки математического ожидания $\mathrm{E}^{u(l)}\left[Q_{\alpha Z(X)}\right]$ следующим образом:

$$\mathrm{E}^{u(l)}\left[Q_{\alpha Z(X)}\right] = Q_{\alpha Z(X)} \pm z_{1-\varepsilon}\sqrt{\frac{Q_{\alpha Z(X)}\left(1-Q_{\alpha Z(X)}\right)}{N_{\alpha Z(X)}}},$$

$$z_{1-\varepsilon} = \sqrt{2}\mathrm{erf}^{-1}\left(1-\frac{2\varepsilon}{7}\right).$$

Границы для математического ожидания от частоты кликов на один импульс из передатчика в отсутствии обратной вспышки ЛФД выражаются как $\mathrm{E}^{u(l)}\left[Q'_{\{\alpha Z(X)\}}\right]$:

$$\mathrm{E}^{u(l)}\left[Q'_{\{\alpha Z(X)\}}\right] = \left(1-p_{\mathrm{bf},\alpha}\right)\mathrm{E}^{\{u(l)\}}\left[Q_{\{\alpha Z(X)\}}\right]$$

На основе этих пересчитанных математических ожиданий используется метод обманных состояний (см. работы [4, 5]): сначала оценивается M'^{l}_{1Z} — нижняя граница кликов однофотонного сигнала в выбранном Алисой базисе Z в отсутствии обратных вспышек ЛФД, аналогично оценке M^{l}_{1Z} в работе [4]. Согласно [4] оценивается однофотонная ошибка E^{u}_{1X} для кликов при выборе Алисой базиса X:

$$E^{u}_{1X} = \frac{\ell_{\mathrm{sift},X}E_{\mu X} - m^{l}_{0X}}{m^{l}_{1X}},$$

где количество битовых ошибок, полученных из-за фоновых событий (темновых отсчетов) при передаче 0-фотонных импульсов, распределено биноминально как $m_{0X} \sim Bi\left(N^{l}_{\mu X}, Y_{0X}/2 \cdot P_{0|\mu}\right)$ и ограничено снизу величиной:

$$m^{l}_{0X} = N^{l}_{\mu X}P_{0|\mu}Y_{0X}/2 - z_{1-\epsilon}\sqrt{N^{l}_{\mu X}P_{0|\mu}Y_{0X}/2\left(1-P_{0|\mu}Y_{0X}/2\right)},$$

Здесь величина $Y^{l}_{0X(Z)}$ находится как:

$$Y'^{l}_{0Z(X)} = \max\left\{\mathrm{E}^{l}\left[Q'_{\nu_2 Z(X)}\right]P_{1|\nu_1} - \mathrm{E}^{u}\left[Q'_{\nu_1 Z(X)}\right]P_{1|\nu_2}\right)/\left(P_{0|\nu_2}P_{1|\nu_1} - P_{0|\nu_1}P_{1|\nu_2}\right), 0\},$$

где $P_{n|\alpha}$ — вероятность n-фотонного импульса в сигнале с интенсивностью α.

Из величин $M_{1Z}^{\prime l}$ и E_{1X}^{u} высчитывается длина секретного ключа — функция усиления секретности просеянного ключа:

$$l_{\text{sec}}^{X} = M_{1Z}^{\prime l}[1 - h_2(E_{1X}^{u})] - \text{leak},$$

где leak — информация, исключенная из ключа в ходе процесса коррекции ошибок.

Литература

1. *Meda A.* [et al.]. Quantifying backflash radiation to prevent zero-error attacks in quantum key distribution // Light: Science & Applications. 2017. V. 6(6): e16261.
2. *Pinheiro P. V. P.* [et al.]. Eavesdropping and countermeasures for backflash side channel in quantum cryptography // Optics express. 2018. V. 26(16). P. 21020–21032.
3. *Gottesman D.* [et al]. Security of quantum key distribution with imperfect devices // Quantum Information & Computation. 2004. P. 325–360.
4. *Trushechkin A. S., Kiktenko E. O., Fedorov A. K.* Practical issues in decoy-state quantum key distribution based on the central limit theorem // Physical Review A. 2017. V. 96(2): 022316.
5. *Ma X.* [et al.]. Practical decoy state for quantum key distribution // Physical Review A. 2005. V. 72(1): 012326.

УДК 53.02

Использование вспомогательных кубитов в разложении вентиля Тоффоли с целью уменьшения количества CNOT операций

***А. А. Марданова*[1,2], *Е. О. Киктенко*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр

Многокубитный вентиль Тоффоли — это элемент в обратимых квантовых схемах, который используется, например, в алгоритме Гровера [1]. Вентиль Тоффоли может быть представлен последовательностью из набора универсальных квантовых операций Клиффорд+T. Гейт контролируемого отрицания CNOT выступает как единственная двухкубитная операция в данном наборе. По этой причине метрикой качества разложения произвольного вентиля по универсальному набору операций может быть количество CNOT гейтов, требуемого для такого представления.

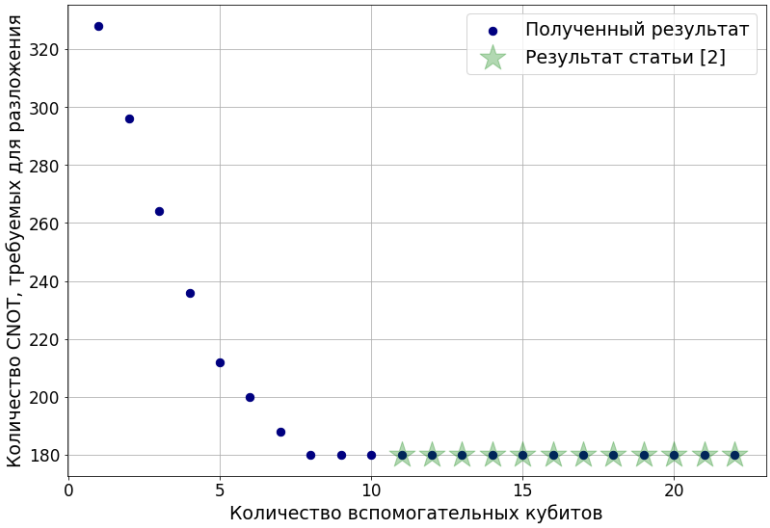


Рис. 1. Зависимость количества CNOT гейтов, требуемых для разложения 25-кубитного вентиля Тоффоли, от количества использованных вспомогательных кубитов в неизвестном начальном состоянии («грязных анцилл»).

В работе предлагается метод разложения многокубитного вентиля Тоффоли с упором на уменьшение количества CNOT гейтов. Данный метод основывается на идее использования гейтов Тоффоли меньшей длины [2] и, в отличие от предыдущих работ, подходит для произвольного количества вспомогательных кубитов («анцилл»). В частности, удалось добиться улучшения по сравнению с результатом [3] (пример разложения 25-кубитного вентиля Тоффоли на рис. 1), который на данный момент является опти-

мальным по количеству дополнительных кубитов и количеству CNOT гейтов. Улучшение происходит за счет применения и обобщения фазовых вентилей Тоффоли, описанных в [3], на многокубитный случай.

Работа была поддержана госкорпорацией «Росатом» в рамках Дорожной карты по квантовым вычислениям (контракт № 868-1.3-15/15-2021 от 5 октября 2021).

Литература

1. *Grover L.K.* Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystacks // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79(2). P. 325–328.
2. *Barenco A.* [et al.]. Elementary gates for quantum computations // Phys. Rev. A. 1995. V. 52(5): 3457.
3. *Maslov D.* Advantages of using relative-phase Toffoli gates with an application to multiple control Toffoli optimizations // Phys. Rev. A. 2016. V. 93(2): 022311.

УДК 535.14

Генерация негауссовых состояний света в схемах с измерениями

А. А. Пошевкина, С. Б. Королев

Санкт-Петербургский государственный университет

Представленная работа посвящена исследованию процесса генерации квантовых негауссовых состояний света в схемах с измерениями.

Актуальность рассмотренной задачи обусловлена чрезвычайной полезностью негауссовых состояний во многих квантово-информационных протоколах. Например, без них невозможны универсальные вычисления в непрерывных переменных [1]. Важно отметить, что негауссовы состояния используются и в процедурах коррекции ошибок, позволяющих выполнять отказоустойчивые вычисления [2]. Кроме того, они рассматриваются как потенциальный ресурс для квантовой криптографии и квантовой коммуникации [3]. А также способны улучшить существующие протоколы квантовой оптики и квантовой информации. Например, в протоколе квантовой телепортации, используя вспомогательные негауссовы состояния, можно значительно уменьшить ошибку преобразования [4,5]. Все это указывает нам на высокую значимость негауссовых состояний в квантово-информационных технологиях.

Однако параметрические процессы, используемые для генерации негауссова света, такие как эффект Керра и др., оказываются малоэффективными, порождая негауссовы состояния непригодные для вышеуказанных приложений. Именно поэтому исследования схем с измерениями привлекают все больше и больше внимания, так как сейчас это единственный способ получать достаточно большую величину негауссовости в оптике.

В данной работе мы исследуем две схемы генерации негауссовых состояний света представленные на рис. 1.

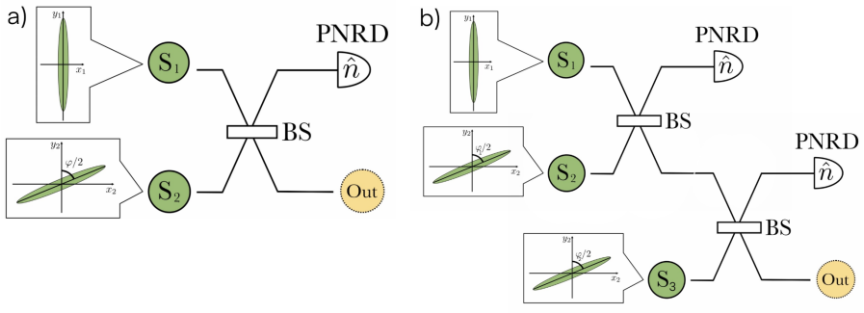


Рис.1. Исследуемые схемы: a) Схема генерации негауссова состояния Out с помощью измерения числа фотонов в одной моде двухмодового перепутанного состояния, которое получается с помощью смешения на светоделителе двух сжатых вакуумных состояний. b) Схема генерации с помощью измерения фотонов в двух модах трехмодового перепутанного состояния. На рисунке: S1, S2, S3 — сжатые вакуумные состояния; BS — светоделители; PNRD — детекторы, измеряющие число фотонов в моде; Out — выходное негауссово состояние.

Целью нашего исследования было сравнить характеристики получаемых состояний в обеих схемах в зависимости от параметров входных состояний и свободных параметров самой схемы. В ходе работы были рассчитаны волновые функции выходных состояний в общем виде для обеих схем.

Более подробно рассмотрены самые вероятные случаи: детектирование одного, двух и трех фотонов, построены функции Вигнера для различных параметров схемы и показано все многообразие состояний доступных для генерации в каждой из схем. Далее мы сравниваем схемы в задаче генерации состояний сжатого кота Шредингера, так как именно они используются во многих протоколах коррекции ошибок. С помощью методов математического анализа и программного пакета «Wolfram Mathematica» мы находим связь параметров, при которой в каждой из схем генерируется состояние кота Шредингера. Кроме того мы показываем, что можно оптимизировать оставшиеся свободные параметры так, чтобы получать желаемые негауссовы состояния с максимальной вероятностью, обнаруживая, что некоторые состояния кота Шредингера можно генерировать с большей вероятностью в схеме с последовательными измерениями, результаты представлены на рис.2:

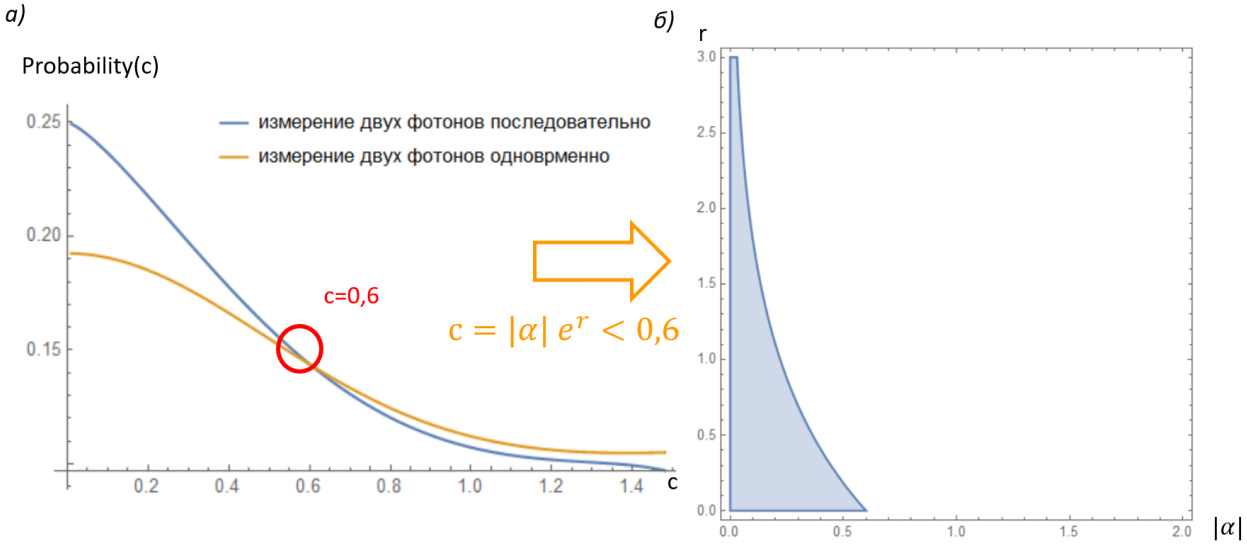


Рис. 2. Максимальная вероятность генерации состояний кота Шредингера в двух схемах: с последовательным измерением фотонов (синий) и с одновременным (оранжевым) (*а*). Область параметров состояния кота Шредингера для которых вероятность генерации в схеме с последовательными измерениями выше (*б*). На рисунках $|\alpha|$ — модуль амплитуды состояния кота Шредингера, r — степень сжатия

Литература

1. *Albarelli F.* [et al.]. Resource theory of quantum non-Gaussianity and Wigner negativity // Phys. Rev. 2018. V. 98: 052350. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.052350.
2. *Niset J., Fiurášek J., Cerf N. J.* No-Go Theorem for Gaussian Quantum Error Correction // Phys. Rev. Lett. 2009. V102: 120501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.120501.
3. *Lee J., Park J., Nha H.* Quantum non-Gaussianity and secure quantum communication // Quantum Information. 2019. V5: 49. DOI: 10.1038/s41534-019-0164-9.
4. *Asavanant W., Takase K., Fukui K.* [et al.]. Wave-function engineering via conditional quantum teleportation with a non-Gaussian entanglement resource. // Phys. Rev. 2021. V.103:043701. DOI: 10.1103/PhysRevA.103.043701.
5. *Zinatullin E. R., Korolev S. B., Golubeva T. Y.* Teleportation protocols with non-Gaussian operations: Conditional photon subtraction versus cubic phase gate // Phys. Rev. 2023. V.107:022422. DOI: 10.1103/PhysRevA.107.022422.

УДК 535.14

Устойчивость негативности функции Вигнера к потерям

Б. Н. Нугманов[1,2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр

Негауссовские квантовые состояния, то есть состояния, характеризующиеся негауссовской формой квазивероятностной функции Вигнера, играют критически важную роль как в фундаментальных тестах квантовой физики [1], так и в области квантовых вычислений [2]. В то же время, такие состояния отличаются повышенной уязвимостью к потерям [3].

В нашем исследовании мы фокусируемся на анализе стойкости различных типов чистых негауссовских состояний к потерям. В качестве универсального средства учета потерь мы используем стандартную модель эффективного светоделителя [4]. Мы количественно характеризуем степень негауссовости состояния объемом отрицательнозначной части функции Вигнера [5].

Как отмечается в работе [6], из всех чистых состояний лишь когерентные и сжатые когерентные состояния обладают нулевой негативностью. После воздействия потерь, квантовое состояние становится смешанным. В данной работе мы анализируем фоковские и сжатые фоковские состояния, а также состояния типа кота Шредингера. Для последнего исследуется предел больших значений среднего числа квантов мощности и показывается, что достигаемая при этом негативность ограничена константой $1/\pi$. При добавлении потерь, негативность быстро убывает, однако окончательно пропадает лишь при $\eta=1/2$. Этот факт был доказан в работе [5] для произвольного негауссова состояния.

В случае $\eta\sim1/2$ функция Вигнера преобразуется в функцию Хусими, что позволяет написать явную аналитическую формулу, описывающую темп роста объема негативности при увеличении параметра η. Однако практически более полезной кажется область малых потерь $\eta\sim1$. В этой области зависимость объема негативности от η аппроксимируется прямой, и ее наклон может быть вычислен как интеграл от лапласиана функции Вигнера в областях негативности.

Выражаю благодарность за помощь в создании работы моему научному руководителю Ф. Я. Халили.

Литература

1. *Bell J. S.* Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics — Cambridge: Cambridge University Press, 1987.
2. *Mari A., Eisert J.* Positive Wigner functions render classical simulation of quantum computation efficient // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 109: 230503.
3. *Zurek W. H.* Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. P. 715–775.
4. *Шляйх В. П.* Квантовая оптика в фазовом пространстве. — М.: Физматлит, 2005.
5. *Leonhardt U., Pau H.* High-accuracy optical homodyne detection with low-efficiency detectors: "preamplification" from antisqueezing // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 4086–4089.
6. *Hudson R.* When is the Wigner quasi-probability density non-negative? // Rep. Math. Phys. 1974. V. 6. P. 249–252.

УДК 530.145.82, 535.14, 520.36

Детектирование заданного фазового сдвига с помощью негауссовских состояний света

***В. Л. Горшенин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр

На фундаментальном уровне чувствительность интерферометрических оптических измерений фазы ограничивается квантовыми флуктуациями света в них [1]. В простейшем случае когерентного состояния фазовая чувствительность соответствует т. н. пределу дробового шума. Известным и уже успешно применяемым способом подавления этих флуктуаций является использование сжатых состояний света [2]. Возможно также использования более экзотических негауссовских состояний, в частности состояния «кота Шредингера» (КШ) [3, 4]. Однако в случае обычного линейного измерения фазы такие состояния не дают существенного выигрыша в чувствительности по сравнению с гауссовскими сжатыми состояниями.

Эти результаты относятся, однако, к задаче измерения неизвестного фазового сдвига. В то же время практическую важность представляет и другая постановка задачи, а именно, бинарное (да/нет) обнаружение некоторого заданного фазового сдвига. Если состояния, соответствующие отсутствию или наличию фазового сдвига, ортогональны друг другу, то они могут различаться в принципе безошибочно. В этом случае негауссовские состояния, которые могут быть ортогональны друг другу, могут позволить радикально улучшить чувствительность.

Известно [5], что смещение состояния КШ на фазовой плоскости на определенный вектор может создавать квантовое состояние, ортогональное к начальному. Такое смещение может генерироваться, например, в интерферометре Маха–Цандера или Майкельсона за счет разности фазовых сдвигов света в плечах. В нашей работе мы рассматриваем симметричный интерферометр Маха–Цандера с антисим-

метричными фазовыми сдвигами в плечах, смотрите рис. 1. На один из входных портов подается яркое когерентное состояние с амплитудой A, на второй вход — четное состояние КШ, волновая функция которого пропорциональна $|\psi\rangle \sim |\alpha\rangle + |-\alpha\rangle$ и содержит только компоненты, соответствующие четному числу квантов. Здесь, $|\alpha\rangle$ - когерентное состояние с амплитудой α. При отсутствии сигнального сдвига фазы это состояние без изменений передается на выход. В то же время при наличии сигнального сдвига в выходном распределении вероятности появляются нечетные компоненты.

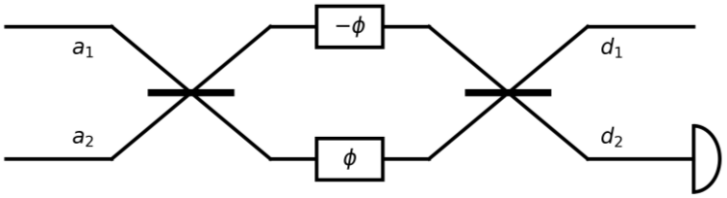
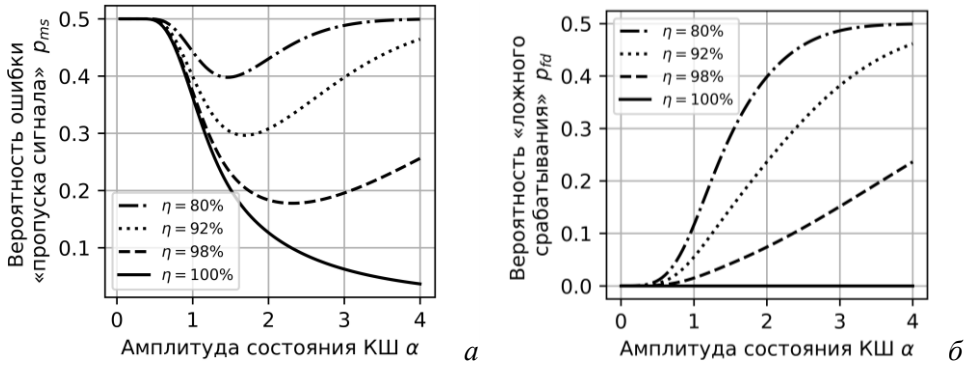


Рис. 1. Оптическая схема антисимметричного интерферометра Маха–Цандера. На моде a_1 когерентное состояние $|A\rangle$, $A \gg 1$, на моде a_2 состояние КШ с амплитудой α. На моде d_2 получается сдвинутое состояние КШ

Это означает, что детектирование нечетного числа квантов на выходе (в случае идеального детектора) однозначно говорит о наличии сигнала, что есть статистическая ошибка «ложного срабатывания» p_{fd} равна нулю. Статистическая ошибка «пропуска сигнала» p_{ms}, равная сумме вероятностей четных фоковских состояний на выходе, при определенном значении фазового сдвига достигает минимума, который может быть много меньше единицы, но остается ненулевым. Однако такой сценарий является приемлемым, в частности, при детектировании сигналов от астрофизических источников, например гравитационных волн.

Рассмотренная схема требует использования детекторов, которые могут измерять точное число фотонов вплоть до некоторого максимального значения. Современные сверхпроводящие детекторы (TES, transition edge sensors) могут быть использованы для этой цели [6]. Реальная квантовая эффективность детектора η увеличивает ошибку пропуска сигнала и делает ошибку «ложного срабатывания» отличной от нуля. Влияние конечной квантовой эффективности было рассмотрено в данной работе.



а *б*

Рис. 2. Вероятности ошибок «пропуска цели» при оптимальном значении сигнала (*а*) и «ложного срабатывания» при отсутствии сигнала (*б*) в зависимости от амплитуды состояния КШ α при различных значениях η

Экспериментально возможно приготовление состояний КШ с амплитудой до α = 1,8 [7]. Квантовая эффективность детекторов типа TES сегодня достигает η = 92,5 % [8] и может достигнуть η = 98 % [9]. Зависимости наименьшей статистической ошибки «пропуска сигнала» p_{ms} и статистической ошибки "ложного срабатывания" p_{fd} от амплитуды состояния КШ представлены на рис. 2(а) и 2(б) соответственно. Отсюда следует, что рассмотренный метод детектирования фиксированного фазового сдвига может быть использован в реальных экспериментах.

Данная работа была поддержана грантом номер 23-1-1-39-1 Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Выражаю благодарность за помощь в создании работы моему научному руководителю Ф. Я. Халили.

Литература

1. *Dwyer S. E., Mansell G. L., Mcculler L.* Squeezing in gravitational wave detectors // Galaxies. 2022. V. 10(2): 46.
2. *Caves C. M.* Quantum-mechanical noise in an interferometer // Phys. Rev. D. 1981. V. 23(8): 1693.

3. *Shukla G.* [et al.]. Improvement in phase-sensitivity of a Mach–Zehnder interferometer with the superposition of Schrödinger's cat-like state with vacuum state as an input under parity measurement // Opt. Quant. Electron. 2023. V. 55(5): 460.
4. *Shukla G.* [et al.]. Quantum sub-phase sensitivity of a Mach–Zehnder interferometer with the superposition of Schrödinger's cat-like state with vacuum state as an input under product detection scheme // Phys. Open. 2024. V. 18: 100200.
5. *Singh R., Teretenkov A. E.* Quantum sensitivity of squeezed Schrödinger cat states // Phys. Open. 2024. V. 18: 100198.
6. *Gerrits T.* [et al.]. Extending single-photon optimized superconducting transition edge sensors beyond the single-photon counting regime // Opt. Express. 2012. V. 20(21). P. 23798–23810.
7. *Ulanov A. E.* [et al.]. Loss-tolerant state engineering for quantum-enhanced metrology via the reverse Hong–Ou–Mandel effect // Nat. Commun. 2016. V. 7(1): 11925.
8. *Stasi L.* [et al.]. Fast High-Efficiency Photon-Number-Resolving Parallel Superconducting Nanowire Single-Photon Detector // Phys. Rev. Appl. 2023. V. 19(6): 064041.
9. *Reddy D. V.* [et al.]. Superconducting nanowire single-photon detectors with 98 % system detection efficiency at 1550 nm // Optica. 2020 V. 7(12). P. 1649–1653.

УДК 537.9

Машинное обучение для оптимизации получения конденсата Бозе–Эйнштейна атомов тулия

***Д. А. Кумпилов*[1,2], *В. В. Цыганок*[1], *Д. А. Першин*[1,3], *И. С. Кожокару*[1,3], *В. А. Хлебников*[1], *И. А. Пырх*[1,2], *А. Е. Руднев*[1,2], *А. В. Акимов*[1,3]**

[1]Российский квантовый центр
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

Ультрахолодные атомы представляют одну из платформ для реализации квантового симулятора — контролируемой квантовой системы, имитирующей поведение другой квантовой системы, для которой трудно или невозможно решить уравнения движения численно [1]. Атом тулия-169 является перспективным кандидатом для реализации квантового симулятора, поскольку имеет большой магнитный момент ($4\mu_B$), где μ_B — магнетон Бора, и плотный спектр резонансов Фано-Фешбаха, позволяющих контролировать межатомные взаимодействия [2].

Для достижения состояния квантового вырождения, в случае бозонов Бозе-Эйнштейновского конденсата (БЭК), в экспериментах с ультрахолодными атомами используется испарительное охлаждение: последовательное понижение высоты стенок удерживающего атомы потенциала — испарительная последовательность — которое приводит к удалению из ловушки самых «горячих» атомов и последующей термализации к более низкой температуре [3]. Далеко не любая испарительная последовательность повышает фазовую плотность атомов в ловушке, поэтому отдельно ставится задача оптимизации испарительного охлаждения.

Ранее уже получен БЭК атомов тулия в оптической дипольной ловушке с использованием Байесовской оптимизации на основе гауссовых процессов [4,5]. Метод основан на построении статистической модели зависимости целевой функции $C(\boldsymbol{X})$ от экспериментальных параметров $\{x_1, x_2, \dots, x_M\} \equiv \boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^M$ и поиска ее оптимума в заданной области.

Количество атомов в БЭК определяет масштаб возможных экспериментов, поэтому стоит задача не просто получения, но и максимизации числа атомов в БЭК. В докладе приведены результаты применения алгоритма Байесовской оптимизации испарительного охлаждения в оптической дипольной ловушке на длине волны 1064 нм [6,7], где в качестве целевой функции выбрана величина

$$C(\mathbf{X}) = \beta_\gamma \gamma + \beta_{BEC} N_{BEC}, \quad \gamma = \frac{ln\frac{D_{PS}}{D_{PS}^{(0)}}}{ln\frac{N^{(0)}}{N}}, \tag{1}$$

где $D_{PS}^{(0)}$ и D_{PS} — фазовые плотности атомного облака в начале испарительной последовательности и в конце соответственно, а $N^{(0)}$ и N — число атомов в начале и в конце испарительной последовательности соответственно. Величину γ называют эффективностью испарения, N_{BEC} — число атомов в конденсате, а

коэффициенты β_γ и β_{BEC} выбираются произвольно. Последовательным удлинением времени испарения обеспечено охлаждение большего числа атомов до предконденсатного состояния (Рис. 1а).

Обнаружено, что даже при существенном увеличении числа атомов в состоянии, близком к квантовому вырождению, количество атомов в БЭК не увеличивается (Рис. 1б). Исходя из этого, была выдвинута гипотеза о существенном влиянии трех-частичных столкновений вблизи точки фазового перехода [8–10]. Чтобы изменить баланс столкновительных процессов при испарении, было изменено магнитное поле в соответствии со спектром резонансов, что в комбинации с методикой оптимизации испарительного охлаждения позволило преодолеть наблюдаемый ранее предел количества атомов в БЭК.[11]

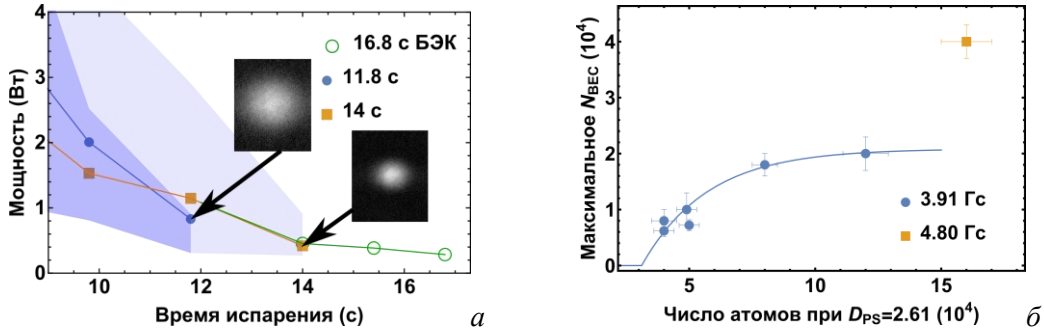


Рис. 1. Последовательное удлинение времени испарения (*а*); приведены фрагменты испарительных последовательностей, полученных алгоритмом Байесовской оптимизации с функцией (1). Насыщение числа атомов в БЭК в магнитном поле 3.91 Гс и число атомов в БЭК в поле 4.8 Гс (*б*)

Литература

1. *Bloch I., Dalibard J., Nascimbène S.* Quantum simulations with ultracold quantum gases // Nat Phys. Nature Publishing Group. 2012. V. 8(4). P. 267–276.
2. *Khlebnikov V. A.* [et al.]. Random to Chaotic Statistic Transformation in Low-Field Fano-Feshbach Resonances of Cold Thulium Atoms // Phys Rev Lett. American Physical Society. 2019. V. 123(21): 213402.
3. *Ketterle W., Druten N. J. V.* Evaporative Cooling of Trapped Atoms // Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics. 1996. V. 37. P. 181–236.
4. *Davletov E.T.* [et al.]. Machine learning for achieving Bose-Einstein condensation of thulium atoms // Phys Rev A (Coll Park). 2020. V. 102(1): 011302.
5. *Shahriari B.* [et al.]. Taking the Human Out of the Loop: A Review of Bayesian Optimization // Proceedings of the IEEE. 2016. V. 104(1). P. 148–175.
6. *Tsyganok V. V.* [et al.]. Bose-Einstein condensate as a diagnostic tool for an optical lattice formed by 1064-nm laser light // Phys Rev A (Coll Park). American Physical Society. 2023. V. 108(1): 013310.
7. *Tsyganok V. V.* [et al.]. Losses of thulium atoms from optical dipole traps operating at 532 and 1064 nm // Phys Rev A (Coll Park). American Physical Society. 2023. V. 107(2): 023315.
8. *Shobu T.* [et al.]. Optimized evaporative cooling for sodium Bose-Einstein condensation against three-body loss // Phys Rev A (Coll Park). American Physical Society. 2011. V. 84(3): 33626.
9. *Söding J.* [et al.]. Three-body decay of a rubidium Bose–Einstein condensate // Applied Physics B. 1999. V. 69(4). P. 257–261.
10. *Burt E. A.* [et al.]. Coherence, Correlations, and Collisions: What One Learns about Bose-Einstein Condensates from Their Decay // Phys Rev Lett. American Physical Society. 1997. V. 79(3). P. 337–340.
11. *Kumpilov D. A.* [et al.]. Inspiration from machine learning on the example of optimization of the Bose-Einstein condensate of thulium atoms in a 1064-nm trap // Phys Rev A (Coll Park). American Physical Society. 2024. V. 109(3): 33313.

УДК 530.145

Общий подход к доказательству секретности дискретных протоколов квантового распределения ключа в реальных системах

***Е. А. Дедков*[1,2,3], *Р. А. Шаховой*[3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]ООО «КуРейт», Москва

В настоящее время разработано большое количество дискретных протоколов квантового распределения ключа (КРК). Одной из главных проблем, однако, является их практическая реализация, которая в силу несовершенства физических компонентов как правило не соответствует виду, описанному в теоретических работах. К счастью, зачастую эти несовершенства можно смоделировать математически и включить в теоретический протокол, тем самым в рамках сделанных допущений доказав секретность практической реализации.

Включение всех несовершенств в протокол, однако, затруднительно. Особенно это касается учета факта генерации когерентных, а не однофотонных, состояний источником. Поэтому анализ секретности зачастую проводят в несколько этапов. Например, в случае протокола BB84:

1. Оценивают количество однофотонных посылок и необходимые статистики в них (уровень битовых ошибок). Например, для протоколов с состояниями-приманками, классически используются результаты [1, 2];

2. Доказывают секретность в случае однофотонного протокола для некоторого уровня сжатия ключа. Для этого как правило пользуются подходами [3, 4] или [5], где достигнут наиболее значимый результат — численная оценка для практически произвольного протокола, см. [6];

3. Утверждают, что секретный ключ генерируется только на основе однофотонных посылок со скоростью, полученной в пункте 2, а оставшиеся биты, полученные на основе многофотонных посылок скомпрометированы и не влияют на секретность после сжатия ключа.

Отличительной особенностью использования в статьях [7, 8] (и многих других) данного подхода является то, что его правомерность, насколько известно авторам, считается очевидной и соответственно строгое доказательство ее всегда опускается.

С одной стороны, действительно, каждый из 3 пунктов этого уже ставшего классическим доказательства достаточно хорошо обоснован. С другой же, за рамками рассмотрения всегда остается переход от первого пункта ко второму. Поскольку КРК претендует на доказательно абсолютно секретное распределение ключа, мы считаем, что всякий анализ секретности обязан быть строго обоснован, и в нем нет места очевидным допущениям.

В данной работе мы претендуем на то, чтобы заполнить данный пробел. В анализе секретности мы рекомендуем руководствоваться следующей схемой, явно обосновывающей правомерность перехода к однофотонным или подобным им протоколам в схемах с реальными источниками:

1. Сформулировать протокол в общем виде (см. ниже).

2. Рассмотреть проекционное измерение Π с набором проекторов $\{\mathcal{P}_k\}_k$, коммутирующее со всеми состояниями $\{\rho_j\}_j$, генерируемыми Алисой. Как правило это операция измерения числа фотонов в импульсе. Тогда можно считать, что сразу после выхода Алисы кто-то, кого мы будем называть Джорджем, производит измерение П не изменяя состояние, генерируемое Алисой.

3. Определить проектор на *логическое пространство* $\mathcal{P}_L$ и соответствующий *индуцированный логический протокол* (см. ниже).

4. Оценить на основе измерений Алисы и Боба статистики p на совокупности всех принятых состояний, сделать на их основе оценки статистик p_L на совокупности *логических состояний* (тех, для которых Джордж получил результат L, однако Алиса и Боб этого не знают).

5. Доказать секретность индуцированного логического протокола для некоторой скорости ключа $R(\boldsymbol{p}_L)$.

Утверждается, что если все 5 пунктов успешно выполнены, то секретность рассматриваемого протокола можно считать доказанной.

Общий вид протокола.

1. Алиса готовит состояния из некоторого набора $\{\rho_j\}_j$ с вероятностями p_j и посылает их Бобу по открытому квантовому каналу, сохраняя информацию о выбранных состояниях в символьную строку $\boldsymbol{j}^A$.

2. Боб реализует на своей стороне POVM $\{M_k^B\}_k$, применяя его к каждому прошедшему через канал состоянию и сохраняя результаты в символьную строку $\mathbf{k}^B$.

3. Алиса и Боб объявляют некоторые функции $f(\boldsymbol{j}^A)$ и $g(\boldsymbol{k}^B)$, действующие посимвольно.

4. Алиса и Боб проводят просеивание ключа, если необходимо и жертвуют часть предварительно сгенерированного ключа на коррекцию ошибок в символьных строках. Также они (в процессе или после) оценивают статистики $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{p}_L$, а также (на основе анализа индуцированного протокола) $R(\boldsymbol{p}_L)$.

5. Алиса и Боб производят усиление секретности.

Индуцированный логический протокол.

1. Алиса готовит состояния из индуцированного набора $\{\tilde{\rho}_j\}_j$ с вероятностями $\tilde{p}_j$, где

$$\tilde{\boldsymbol{\rho}}_{\boldsymbol{j}} \equiv \frac{\boldsymbol{\mathcal{P}_L \rho_j \mathcal{P}_L}}{\mathrm{tr}\, \boldsymbol{\mathcal{P}_L \rho_j}}, \quad \tilde{\boldsymbol{p}}_{\boldsymbol{j}} \equiv \frac{\mathrm{tr}\, \boldsymbol{\mathcal{P}_L \rho_j}}{\sum_{\boldsymbol{j}} \mathrm{tr}\, \boldsymbol{\mathcal{P}_L \rho_j}},$$

и посылает их Бобу по открытому квантовому каналу, сохраняя информацию о выбранных состояниях в символьную строку $\boldsymbol{j}^A$.

2. Боб реализует на своей стороне ПОВМ $\{\widetilde{M}_k^B\}_k$, где

$$\widetilde{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{B}} \equiv \widetilde{\boldsymbol{M}}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{B}}\big|_{\mathcal{H}_L},$$

применяя его к каждому прошедшему через канал состоянию и сохраняя результаты в символьную строку $\mathbf{k}^B$.

3. Алиса и Боб объявляют некоторые функции $f(\boldsymbol{j}^A)$ и $g(\boldsymbol{k}^B)$, действующие посимвольно.

4. Алиса и Боб проводят просеивание ключа, если необходимо и жертвуют часть предварительно сгенерированного ключа на коррекцию ошибок в символьных строках. Также они (в процессе или после) оценивают статистику $\boldsymbol{p}_L$ и (на основе теоретического анализа протокола) $R(\boldsymbol{p}_L)$.

5. Алиса и Боб производят усиление секретности.

Литература

1. *Ma X.* [et al.]. Practical decoy state for quantum key distribution // Phys. Rev. A. 2005. V. 72: 012326. DOI: 10.1103/PhysRevA.72.012326.
2. *Zhang Z.* [et al.]. Improved key-rate bounds for practical decoy-state quantum-key-distribution systems // Phys. Rev. A. 2017. V. 95: 012333. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.012333.
3. *Gottesman D.* [et al.]. Security of quantum key distribution with imperfect devices // Quantum inf. Comput. 2003. V. 5: 136. DOI: 10.1109/ISIT.2004.1365172.
4. *Koashi M.* Simple security proof of quantum key distribution based on complementarity // New J. Phys. 2009. V. 11: 045018. DOI: 10.1088/1367-2630/11/4/045018.
5. *Devetak I., Winter A.* Distillation of secret key and entanglement from quantum states // Proc. R. Soc. A. 2005. V. 461. P. 207–235. DOI: 10.1098/rspa.2004.1372.
6. *Winick A.* [et. al.]. Reliable numerical key rates for quantum key distribution // Quantum. 2018. V. 2. P. 77–104. DOI: 10.22331/q-2018-07-26-77.
7. *Lukamarini M.* [et al.]. Practical security bounds against the Trojan-horse attack in quantum key distribution // Phys. Rev. X. 2015. V. 5(3): 031030. DOI: 10.1103/PhysRevX.5.031030.
8. *Fung C.-H. F., Lo, H.-K.* Security proof of a three-state quantum-key-distribution protocol without rotational symmetry // Phys. Rev. A. 2006. V. 74(4): 042342. DOI: 10.1103/PhysRevA.74.042342.

УДК 538.915

QASMC — Оптимизирующий транспилятор квантового языка программирования OpenQASM 2.0

***Д. А. Дрожжин*[1,2], *А. С. Николаева*[1,2], *Е. О. Киктенко*[2], *А. К. Федоров*[1,2]**

[1]Национальный университет науки и технологий МИСИС
[2]Российский квантовый центр

Квантовые вычисления — развивающееся направление квантовой физики и теории информации. Многие области теоретических исследований, такие как машинное обучение, нейронные сети, квантовая

химия и дискретные алгоритмы, могут быть эффективно реализованы на квантовых вычислителях. Одним из наиболее распространенных способов описания квантовой программы является язык квантового программирования OpenQASM [1], который использует текстовый формат для запаиси квантовых операций. Он разработан как промежуточное представление, которое может использоваться решениями более высокого уровня для связи с квантовым аппаратным уровнем. Платформы Qiskit, Cirq и PennyLane предоставляют абстракции для создания программы на языке OpenQASM и ее выполнения на указанном квантовом устройстве.

QASMC предлагает схожий функционал, при этом позволяет разрабатывать и добавлять поддержку новых аппаратных решений для транспиляции OpenQASM с учетом доступного нативного набора квантовых операций. Также, *QASMC* предоставляет возможность вывода транспилированных цепочек в любом другом промежуточном представлении, доступном для конкретного аппаратного решения. Так, в *QASMC* реализована транспиляция цепочки в байткод для запуска на эмуляторе квантового компьютера [2] и в json формат, поддерживаемый квантовым вычислителем на цепочке холодных ионов $^{171}Yb^{+}$ [3] с набором нативных гейтов *RZ*, *R*, *XX*.

QASMC представляет из себя приложение для запуска в командной строке, разработанное на языке программирования Rust. Это подразумевает оптимизации исполняемого кода, доступные в LLVM, продвинутую обработку ошибок и более быстрые циклы разработки/отладки. Процесс транспиляции состоит из четырех этапов: парсера OpenQASM, препроцессора, оптимизатора и сериализатора. Этапы реализованы в модульной манере, что позволяет добавлять новые проходы препроцессора и оптимизатора и новые виды выходных форматов квантовой цепочки.

В транспиляторе *QASMC* также была проведена работа с пользовательским опытом, что привело к более воспринимаемым сообщениям о нарушении инвариантов и предупреждения в квантовой цепочке OpenQASM. Возможные сообщения об ошибках включают: пересекающиеся регистры в одной квантовой операции; индексы используемых квантовых/классических регистров, выходящие за их размер; неизвестные или неиспользуемые регистры или параметры; арифметические и типизированные ошибки в математических выражениях.

Дальнейшими направлениями разработки являются: учет топологии двухчастичного взаимодействия, кудитная компиляция, расширение списка поддерживаемых устройств и форматов, а также разработка специализированных оптимизаций для них.

Исследование выполнено при поддержке Дорожной карты по квантовым вычислениям (Соглашение № 868-1.3-15/15-2021).

Литература

1. *Cross A.W.* [et. al.]. Open Quantum Assembly Language // arXiv preprint. [2017]. arXiv: 1707.03429v2;
2. *Luchnikov I.A.* [et. al.]. High-performance state-vector emulator of a gate-based quantum processor implemented in the Rust programming language // AIP Conf. Proc. 2023. V. 2948: 020022;
3. *Aksenov M.A.* [et. al.]. Realizing quantum gates with optically-addressable $^{171}Yb^{+}$ ion qudits // Phys. Rev. 2023. A 107: 052612.

УДК:004.056.55

Учет влияния разной эффективности детекторов для установки с пассивным выбором базиса в случае квантового канала спутник земля

***Е. И. Ивченко*[1,2,3], *А. В. Хмелев*[1,2,3], *В. Л. Курочкин*[1,3,4]**

[1]Российский квантовый центр
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]QSpace Technologies
[4]Центр квантовых коммуникаций Национальной технологической инициативы

Квантовое распределение ключей на большие расстояния по средствам спутниковой передачи достигло значительных успехов [1, 2], но еще существуют неучтенные практические недостатки данных экспериментальных установок. Одна из проблем несоответствие квантовой эффективности детекторов для различных типов посылаемых состояний. Разбаланс возникает в следствии разной оптической эффективности каналов поляризации и невозможности произвести одинаковые детекторы. Есть исследования влияния разбаланса для оптоволоконных систем и активного выбора базиса [3–5], однако для передачи в открытом

пространстве величина разбаланса существенно увеличивается, и требует большего внимания. В данной работе получается аналитическая формула для скорости генерации ключа в случае квантового распределения ключей (КРК) с пассивным выбором базиса, и учетом разбаланса детекторов. Смоделирован один пролет с использованием полуэмпирической модели КРК «спутник-земля» [6], и реальных параметров установки. По полученным данным рассчитывается ключ, полученный за один пролет.

Мы работаем в предположении четырех детекторов с различными эффективностями $\eta_{z,0}, \eta_{z,1}, \eta_{x,0}, \eta_{x,1}$, которые соответствуют регистрации конкретных состояний в двух базисах. В качестве протокола используется BB84 с вероятностью испускания состояния в X базисе p_x, и p_z для Z базиса. Следовательно операторы измерения Боба будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} P^B_{z,0} &= p_z\eta_{z,0}|0\rangle\langle 0|, \quad P^B_{z,1} = p_z\eta_{z,1}|1\rangle\langle 1|; \\ P^B_{x,0} &= p_x\eta_{x,0}|+\rangle\langle +|, \quad P^B_{x,1} = p_x\eta_{x,1}|-\rangle\langle -|; \end{aligned} \tag{1}$$

Для такой системы ограничения на наблюдаемые значения будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} Tr\Gamma_1\rho_{AB} &= Tr\left(p_z I_A \otimes P^B_{z,0}\right)\rho_{AB} = p_{z,0}, \\ Tr\Gamma_2\rho_{AB} &= Tr\left(p_z I_A \otimes P^B_{z,1}\right)\rho_{AB} = p_{z,1}, \\ Tr\Gamma_3\rho_{AB} &= Tr\left(p_x I_A \otimes P^B_{x,0}\right)\rho_{AB} = p_{x,0}, \\ Tr\Gamma_4\rho_{AB} &= Tr\left(p_x I_A \otimes P^B_{x,1}\right)\rho_{AB} = p_{x,1}, \\ Tr\Gamma_5\rho_{AB} &= Tr\left(\frac{1}{p_z}\left(\eta_{z,0}(|0\rangle\langle 0| \otimes P^B_{z,1}) + \eta_{z,1}(|1\rangle\langle 1| \otimes P^B_{z,0})\right)\right)\rho_{AB} = \eta_{z,0}\eta_{z,1}q_z, \\ Tr\Gamma_6\rho_{AB} &= Tr\left(\frac{1}{p_x}\left(\eta_{x,0}(|+\rangle\langle +| \otimes P^B_{x,1}) + \eta_{x,1}(|-\rangle\langle -| \otimes P^B_{x,0})\right)\right)\rho_{AB} = \eta_{x,0}\eta_{x,1}q_x, \\ Tr\Gamma_7\rho_{AB} &= Tr\left(p_z I_A \otimes (P^B_{z,0} + P^B_{z,1}) + p_x I_A \otimes (P^B_{x,0} + P^B_{x,1})\right)\rho_{AB} = p_{det}, \end{aligned} \tag{2}$$

где ρ_{AB} — распределяемое между Алисой и Бобом состояние, $\Gamma_1 - \Gamma_4$ — операторы измерения определенного пришедшего состояния, Γ_5, Γ_6 — операторы ошибок в базисе Z и X, , Γ_7 — оператор детектирования пришедшего импульса.

Для вычисления скорости генерации ключа существует два подхода. Первый, разделение данных по базисам и их отдельный анализ на основе статьи [5]. Второй, анализ общего объема данных что значительно уменьшает статистические флуктуации. В данной работе представлен первый подход, тогда как второй будет рассмотрен в дальнейших изысканиях. Итоговая скорость генерации будет определяться выражением следующим выражением:

$$K \geq p_x^2 p_{det}\left(h\left(\frac{1-\delta_z^x}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^{x2}+\delta_x^{x2}}}{2}\right) + fh(Q_x)\right) + p_z^2 p_{det}\left(h\left(\frac{1-\delta_z^z}{2}\right) - h\left(\frac{1-\sqrt{\delta_z^{z2}+\delta_x^{z2}}}{2}\right) + fh(Q_z)\right) \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \delta_z^z &= \frac{p_{z,0}-p_{z,1}}{p_{det}^z}, \quad \delta_x^z = \frac{\sqrt{\eta_{z,0}\eta_{z,1}}(t_x - 2q_z)}{p_{det}^z}; \\ \delta_z^x &= \frac{p_{z,0}-p_{z,1}}{p_{det}^x}, \quad \delta_x^x = \frac{\sqrt{\eta_{x,0}\eta_{x,1}}(t_z - 2q_x)}{p_{det}^x}; \end{aligned} \tag{4}$$

где p_{det}^a — вероятность задетектировать импульс в базисе a, t_a — пропускание канала для базиса a, Q_a — процент ошибок в базисе a, $h(x)$ — бинарная энтропия.

Для моделирования берем параметры, соответствующие реальной наземной станции с апертурой телескопа 600 мм [6], что дает $p_x, p_z = 0{,}5$, $QBER = 0.047$, $\eta_{z,0} = 0{,}05, \eta_{z,1} = 0{,}025, \eta_{x,0} = 0{,}0375, \eta_{x,1} = 0{,}026$.

По итогам работы мы получили аналитическую формулу для скорости генерации секретной последовательности для КРК с использованием пассивного выбора базиса и применили ее для расчета длины ключа, полученного за смоделированный зенитный пролет спутника. Для представленных параметров размер секретной последовательности составил 300 Kbits.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Стратегический проект «Квантовый Интернет»).

Литература

1. *Lu C. Y.* [et al.]. Micius quantum experiments in space // Rev. Mod. Phys. 2022. V. 94(3): 035001. DOI: 10.1103/RevModPhys.94.035001.
2. *Liao S. K.* [et al.]. Satellite-to-ground quantum key distribution // Nature. 2017. V. 549(7670). P. 43–47. DOI: 10.1038/nature23655.
3. *Ma X.* [et al.]. Practical decoy state for quantum key distribution // Phys. Rev. A. 2005. V. 72(1): 012326. DOI: 10.1103/PhysRevA.72.012326.
4. *Bochkov M. K., Trushechkin A. S.* Security of quantum key distribution with detection-efficiency mismatch in the single-photon case: Tight bounds // Phys. Rev. A. 2019. V. 99(3): 032308. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.032308.
5. *Trushechkin A.* Security of quantum key distribution with detection-efficiency mismatch in the multiphoton case // Quantum. 2022. V. 6: 771. DOI: 10.22331/q-2022-07-22-771.
6. *Khmelev A. V.* [et al.]. Semi-empirical satellite-to-ground quantum key distribution model for realistic receivers // Entropy. 2023. V. 25(4). P. 670. DOI: 10.3390/e25040670.

УДК 530.145.81

Ли-алгебраические Лиувиллианы

***Е. Д. Чистякова*[1,2], *А. И. Лотков*[2,3], *А. К. Федоров*[2,4] , *Д. В. Курлов*[2,3,4]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]University of Basel, Switzerland
[4]Национальный университет науки и технологии МИСиС

В настоящий момент в связи с быстрым развитием квантовых технологий возникает все больший интерес к изучению открытых квантовых систем. В частности, фазовые переходы в открытых квантовых системах вызывают интерес не только с практической, но и теоретической стороны науки, где существует множество неразрешенных проблем. Проводя параллель с фазовыми переходами в унитарных системах, где важную роль играет конформная симметрия, возникает желание адаптировать методы конформной теории поля для фазовых переходов в открытых марковских системах с учетом того, что в открытой квантовой системе пространство состояний и временная динамика устроены принципиально по-другому.

В рамках более общей задачи можно рассмотреть, как должны быть устроены пространственно-временные симметрии в диссипативном случае. В первую очередь, необходимо разобраться с тем, как реализовывать представления алгебр симметрий. Простейшим случаем пространственно-временной симметрии, очевидно, является группа временных трансляций. В открытых марковских системах временная динамика традиционно описывается уравнением Линдблада, и временная эволюция задается супероператором Лиувилля (лиувиллианом).

В нашей работе мы рассматриваем простейший случай лиувилиана — генератора временных трансляций — задаваемого квадратичным гамильтонианом и линейными джамп операторами. Мы применяем к нему формализм третичного квантования [1], благодаря чему удается записать лиувиллиан в форме, удобной для изучения представлений алгебр симметрий. Используя данный формализм, мы явным образом строим представления алгебры симметрий для диссипативных систем указанного типа.

В качестве примеров мы рассматриваем трехмерное представление алгебры so(3) и фундаментальное представление алгебры одномерных конформных преобразований sl(2,R) для бозонных и фермионных систем.

Также, в качестве развития работы [2], где к закрытой квантовой системе диссипация добавляется таким образом, чтобы не нарушить конформную симметрию, мы привели пример открытой квантовой системы, которая описывается одной копией алгебры Вирасоро вместо двух. В данном случае конформная симметрия может быть реализована в системе с нулевым гамильтонианом и диссипацией специального вида.

Работа была поддержана госкорпорацией «Росатом» в рамках Дорожной карты по квантовым вычислениям (контракт № 868-1.3-15/15-2021 от 5 октября 2021).

Литература

1. *Prosen T.* Third quantization: a general method to solve master equations for quadratic open Fermi systems // New J. Phys. 2008 V. 10(4): 043026.

2. *Lotkov A. I.* [et al.]. Conformal symmetry in quasifree Markovian open quantum systems // Phys. Rev. B. 2023 V. 108(6): 064312.

УДК 538.945

Измерение добротности сверхпроводникового кубита-трансмона

***И. Ю. Горбунов*[1], *А. Е. Толстобров*[1,4], *Г. П. Федоров*[1,2,4], *О. В. Астафьев*[3,1]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]НИТУ МИСИС
[3]Сколковский институт науки и технологий
[4]Российский квантовый центр

Роль квантовой механики при описании явлений, лежащих в основе работоспособности современных устройств, трудно переоценить. Суперпозиция квантовых состояний является ключевым понятием в области квантовых вычислений, предлагающим возможность определенным образом приготавливать квантовую систему в особое состояние, совершенно отличающееся от реализуемого в классических вычислителях. Это, в свою очередь, позволяет значительно быстрее выполнять множество прикладных задач. Например, невозможная для суперкомпьютера задача о разложении целого числа на простые множители за полиномиальное время становится разрешимой благодаря представленному Питером Шором квантовому алгоритму [1]. Тогда разработка новой системы шифрования становится актуальным вопросом, поскольку защита цифровых данных пользователей основана на предположении о невыполнимости такого разложения за разумное время. Также время вычисления энергии атомов и молекул экспоненциально увеличивается при использовании систем на классическом компьютере, но уже полиномиально с использованием квантовых алгоритмов. Показано, что такие алгоритмы могут быть применены к задачам, представляющим химический интерес [2].

Однако при выполнении сложных вычислений требуется точное квантовое оборудование, слабо подверженное влиянию помех. Шум от окружающей среды уменьшает время нахождения квантовой системы в желаемом состоянии, что затрудняет реализацию квантовых алгоритмов. В связи с этим важно вводить характеристики источников шума и изучать механизмы влияния этих источников на систему.

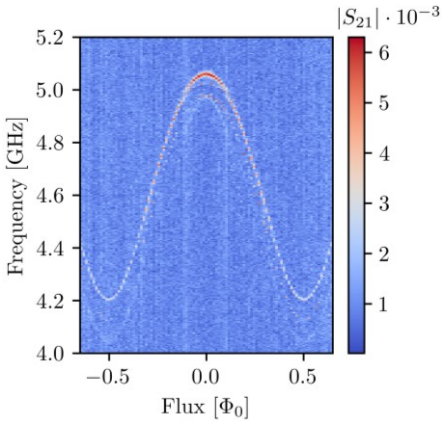


Рис. 1. Зависимость частоты кубита от прикладываемого к сквиду магнитного потока. Цветом обозначено пропускание сигнала, передаваемого через линию считывания

Реализация кубита имеет различные вариации. Одним из многообещающих решений является использование сверхпроводящих квантовых цепей, что и было реализовано в нашей экспериментальной установке. Выбранный тип кубита — трансмон — является популярным ввиду высокого ангармонизма и низкой зарядовой дисперсии, что приводит к успеху в достижении более высоких времен декогеренции [3].

В данной работе проведено определение и уточнение частоты однофотонного перехода одного из кубитов-трансмонов 12-кубитного квантового процессора с помощью экспериментов, описанных в статье [4]. Зависимость резонансной частоты кубита от приложенного к сквиду постоянного магнитного потока показана на рис. 1. Произведено измерение характерных времен релаксации T_1, T_{2E}, T_2^* и времени затухания раби-осцилляций T_R в зависимости от резонансной частоты квантовой системы (табл. 1) с последующей оценкой эффективной добротности (табл. 2) согласно формулам:

$$\Gamma_1 = \frac{1}{T_1} \Rightarrow Q_1 = \frac{2\pi\nu_{\text{рез}}}{\Gamma_1}, \quad (1)$$

где Γ_1 — декремент затухания по энергии, Q_1 — эффективная добротность кубита.

Таблица 1. Параметры кубита для различных значений резонансной частоты (рис. 1).

$\nu_{\text{рез}}$, ГГц	T_1, мкс	T_{2E}, мкс	T_2^*, мкс	T_R, мкс	Ω_R, МГц
$5{,}058 \pm 0{,}016 \cdot 10^{-3}$	$15{,}93 \pm 0{,}65$	$4{,}8 \pm 0{,}4$	$4{,}12 \pm 0{,}26$	$10{,}70 \pm 0{,}37$	$4{,}10 \pm 0{,}00$
$4{,}964 \pm 0{,}032 \cdot 10^{-3}$	$17{,}22 \pm 0{,}35$	$7{,}02 \pm 0{,}16$	$1{,}39 \pm 0{,}05$	$16{,}84 \pm 0{,}49$	$8{,}67 \pm 0{,}00$
$4{,}698 \pm 0{,}012 \cdot 10^{-3}$	$19{,}62 \pm 0{,}48$	$5{,}97 \pm 0{,}17$	$0{,}83 \pm 0{,}03$	$13{,}26 \pm 0{,}34$	$9{,}87 \pm 0{,}00$

Таблица 2. Вычисление эффективной добротности кубита для различных значений резонансной частоты (рис. 1)

$\nu_{\text{рез}}$, ГГц	T_1, мкс	Γ_1, 10^4 с$^{-1}$	Q_1, 10^4
$5{,}058 \pm 0{,}016 \cdot 10^{-3}$	$15{,}93 \pm 0{,}65$	$6{,}28 \pm 0{,}26$	$50{,}61 \pm 2{,}10$
$4{,}964 \pm 0{,}032 \cdot 10^{-3}$	$17{,}22 \pm 0{,}35$	$5{,}81 \pm 0{,}12$	$53{,}68 \pm 1{,}10$
$4{,}698 \pm 0{,}012 \cdot 10^{-3}$	$19{,}62 \pm 0{,}48$	$5{,}09 \pm 0{,}12$	$57{,}99 \pm 1{,}37$

Для сравнения, образцы других научных групп демонстрируют примерно тот же уровень: 16,8 мкс [5], ~20 мкс [6], ~ 30 мкс [7].

Работа выполнена при поддержке ГК «Росатом» в рамках реализации дорожной карты «Квантовые вычисления» (Договор № 868-1.3-15/15-2021 от 5 октября 2021 г. и Договор № МЦКТ-2 от 14 июля 2022 г.). Авторы благодарят А. Стрельникова и А. Кабанова за ценную техническую поддержку. Все образцы были изготовлены в Центре коллективного пользования (ЦКП МФТИ) и ОПБ Института квантовых технологий МФТИ.

Литература

1. *Shor P. W.* Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring // Proceedings 35th ASFCS. 1994. P. 124–134. DOI: 10.1109/SFCS.1994.365700.
2. *Aspuru-Guzik A.* [et al.]. Simulated quantum computation of molecular energies // Sci. 2005. V.309(5741). P. 1704–1707.
3. *Koch J.* [et al.]. Charge insensitive qubit design derived from the Cooper pair box // Phys. Rev. A. 2007. V. 76(4): 042319.
4. *Krantz P.* [et al.]. A quantum engineer's guide to superconducting qubits // Phys. Rev. Appl. 2019. V.6(2): 021318.
5. Rigetti Computing [Электронный портал]. URL: https://www.rigetti.com/novera (дата обращения: 28.02.2024).
6. *Maiani A.* [et al.]. Entangling Transmons with Low-Frequency Protected Superconducting Qubits // PRX Quantum. 2022. V. 3(3): 030329.
7. *Mamin H. J.* [et al.]. Merged-Element Transmons: Design and Qubit Performance // Phys. Rev. Appl. 2021. V. 16(2): 024023.

УДК 535.012.21

Поверхностные моды Дьяконова в кольцевых структурах

***И. И. Степанов*[1,2], *О. В. Боровкова*[1,4], *И. А. Биленко*[1,4], *Д. А. Чермошенцев*[1,2,3]**

[1]Российский квантовый центр
[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Сколковский институт науки и технологий
[4]Московского государственный университет им. М. В. Ломоносова

В данной работе предсказано и обнаружено существование поверхностных мод Дьяконова в системе двух одноосных анизотропных кольцевых резонаторов с оптическими осями, образующими угол 90°.

Дьяконовские поверхностные волны — это особый вид электромагнитного излучения, распространяющийся на границе двух сред с различной анизотропией, который был предсказан Михаилом Дьяконовым в конце 80х [1]. Изначально данный эффект был открыт для бесконечных интерфейсов, хотя бы один из которых анизотропный. Однако в дальнейшем было показано [2], что Дьяконовские волны могут существовать и в системе из двух анизотропных материалов конечного размера. Данные волны распро-

страняются без материальных потерь вблизи границы, а также они сильно локализованы, что может быть полезно в передачи данных и изготовлении сенсоров.

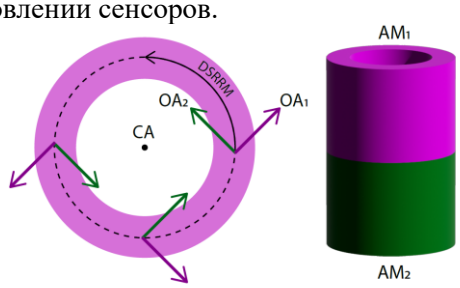


Рис. 1. Структура для изучения поверхностных мод Дьяконова. $OA_{1(2)}$ оптические оси материалов, $AM_{1(2)}$ анизотропные материалы, CA ось цилиндра

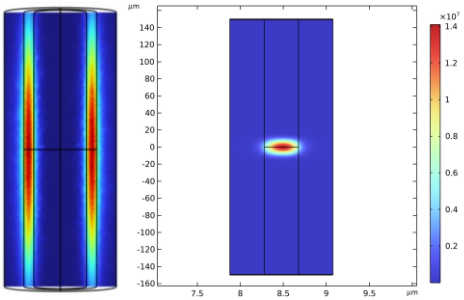


Рис.2 Вид трехмерной и двухмерной моделей в программе COMSOL Multiphysics

Для дальнейшего исследования будет использоваться модель структуры, показанная на рис. 1. Данная система состоит из двух кольцевых резонаторов, сделанных из одноосных анизотропных кристаллов (AM_1 и AM_2). Кристаллы устроены таким образом, что, по мере вращения вокруг центральной оси, угол, который образуют оптические оси, не меняется и остается 90.

С помощью COMSOL Multiphysics были разработаны трехмерная и двухмерная численные модели рис. 2. Теоретический вывод константы распространения Дьяконовской волны для прямого волновода через теорию возмущений [3] был дополнен резонансным условием кольцевого волновода. Такой подход допустим в предположении достаточно больших радиусов кольцевых резонаторов. Сравнивая результаты межмодового расстояния, полученные с помощью численного моделирования и теоретически можно видеть, что они очень близки при радиусах колец больше 1 мкм.

Также проводилось исследование поляризации полученных Дьяконовских мод путем исследования степени циркулярной поляризации. Было выявлено, что поляризация Дьяконовской моды является эллиптической в каждой точке.

Наконец были рассмотрены Дьяконовские моды высших порядков. Их существование было подтверждено, а также было обнаружено, что отношение произведения резонансной частоты на ширину волновода к скорости света сохраняется для мод одних порядков, независимо от радиуса и ширины кольцевых резонаторов.

Полученные результаты впервые показывают наличие Дьяконовских мод в кольцевых структурах и открывают новые возможности для изучения их потенциальных областей применения.

Литература

1. *Dyakonov M. I.* New type of electromagnetic wave propagating at an interface // JETP. 1988. V. 94. № 4. P.119–123.
2. *Chermoshentsev D. A.* Dimensional confinement and waveguide effect of Dyakonov surface waves in twisted confined media // Nanophot. 2020. V. 9(16) P. 4785–4797.
3. *Anikin E. V.* Dyakonov-like waveguide modes in an interfacial strip waveguide // Phys. Rev. B. 2020. V. 102(16): 161113/

УДК 621.373.826

Приготовление квантовых состояний методом оптической инжекции без фазового модулятора

***И. С. Кудряшов*[1,2], *Р. А. Шаховой*[1,3]**

[1]ООО «КуРэйт»
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[3]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС

Сегодня быстро идет развитие методов КРК (квантового распределения ключей) и их внедрения в системы сетевой защиты [1–3]. Производимые системы КРК хорошо подходят для магистральных сетей, но достаточно дороги для развертывания в городских сетях. Возникает запрос на удешевления и упрощение схемы КРК с целью более широкого развертывания в городских агломерациях.

В этой работе мы предлагаем новый метод фазово-временного кодирования с помощью оптической инжекции, который позволяет отказаться от использования фазовых модуляторов в установке КРК, что может уменьшить стоимость и габариты передатчика. Впервые использование метода оптической инжекции для задач кодирования впервые было описано в [4], а теоретические исследования проведены в [5]. Метод с использованием оптической инжекции продемонстрировал свою эффективность в [6, 7].

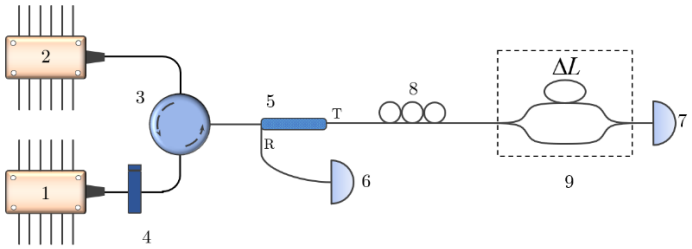


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: *1* — управляющий лазер; *2* — ведомый лазер; *3* — оптический циркулятор; *4* — настраиваемый оптический аттенюатор; *5* — полосовой фильтр; *6* и *7* — фотодетектор; *8* — поляризационный контроллер; *9* — интегральный интерферометр Маха–Цендера

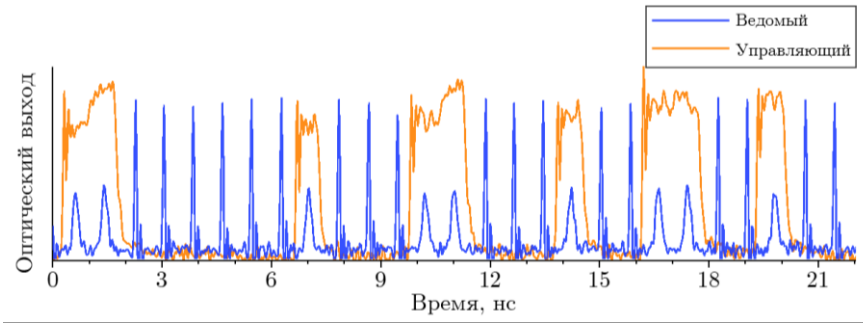


Рис. 2. Последовательность импульсов управляющего лазера и ведомого лазера на выходе полосового фильтра

Оптическая схема эксперимента, который мы провели для демонстрации предлагаемого подхода, изображена на рис. 1. Длины волн двух лазеров соответствуют разным DWDM каналам стандартной сетки телекоммуникационных частот. В момент излучения импульса со стороны управляющего лазера, импульсы ведомого лазера, испускаемые в это время, меняют свою длину волны до значения длины волны управляющего лазера благодаря эффекту захвата частоты. Заметим также, что оба лазеры работают в режиме переключения усиления — это является условием для обеспечения случайной фазы импульсов относительно друг друга. Характерная последовательность импульсов управляющего и управляемого лазера, полученная нами в эксперименте, показана на рис. 2.

Литература

1. *Zhang Q.* [et al.]. Large scale quantum key distribution: challenges and solutions // Optics express. 2018. V. 26(18). P. 24260–24273.
2. *Sasaki M.* [et al.]. Tokyo QKD network and the evolution to secure photonic network // CLEO: Science and Innovations. 2011: JTuC1.

3. *Peev M.* [et al.]. The SECOQC quantum key distribution network in Vienna // New Journal of Physics. 2009. V. 11(7): 075001.
4. *Yuan Z. L.* [et al.]. Directly phase-modulated light source // Physical Review X. 2016. V. 6(3): 031044.
5. *Shakhovoy R.* [et al.]. Direct phase modulation via optical injection: theoretical study // Optics express. 2021. V. 29(6): 9574–9588.
6. *Paraïso T. K.* [et al.]. A modulator-free quantum key distribution transmitter chip // Quantum Information. 2019. V. *5*(1): 42.
7. *Roberts G. L.* [et al.]. A direct GHz-clocked phase and intensity modulated transmitter applied to quantum key distribution // Quantum Science and Technology. 2018. V. 3(4): 045010.

УДК 530.145

Разработка линейной ловушки Пауля для квантовых вычислений

***И. С. Герасин*[1,2,3], *И. А. Семериков*[1,2]**

[1]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН
[2]Российский квантовый центр
[3]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

На сегодняшний день наиболее производительные квантовые компьютеры используют в качестве кубитов холодные одиночные ионы [1]. Согласно критериям Ди Винченцо, квантовый компьютер должен быт масштабируемой системой. Для удовлетворения данного критерия была предложена архитектура Quantum Charge-Coupled Device (QCCD) [2]. В такой конфигурации устройство разделено на зоны, где производится детектирование, хранение, загрузка и квантовые операции. Для манипуляций индивидуальными ионами используются ловушки Пауля, в которых удерживаются и передвигаются ионы. Для изготовления ловушек предлагается использование технологии производства микрочипов [3].

В работе рассматривается проектирование двуслойной линейной ловушки Пауля и оптимизация ее параметров. Рассматривается зависимость параметров удержания ловушки, а именно положение минимума потенциальной энергии, параметра стабильности ловушки и глубины потенциала, в зависимости от геометрических размеров и параметров ВЧ напряжения (амплитуда и частота). С точки зрения эксперимента важно увеличивать расстояние до электродов ловушки с целью снижения темпов нагрева и фиксировать значение параметра стабильности. Кроме того, амплитуда ВЧ напряжения, подаваемого на электроды, должна быть меньше напряжения пробоя. При наличии вышеперечисленных условий, оптимизируется глубина потенциала. Таким образом была спроектирована ловушка для использования в дальнейших экспериментах по захвату ионов.

Литература

1. *Chen J. S.* [et al.]. Benchmarking a trapped-ion quantum computer with 29 algorithmic qubits // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2308.05071.
2. *Wineland D. J.* [et al.]. Experimental issues in coherent quantum-state manipulation of trapped atomic ions // Journal of research of the National Institute of Standards and Technology. 1998. V. 103(3). P. 259–260.
3. *Hughes M. D.* [et al.]. Microfabricated ion traps // Contemporary Physics. 2011. V. 52(6). P. 505–529.

УДК 538.945

Квазизарядовый сверхпроводниковый кубит на основе сверхиндуктивности в планарной архитектуре

***А. В. Кузнецова*[1,2 3], *А. В. Саблук*[2], *Н. А. Малеева*[2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС
[3]Российский квантовый центр

Сверхпроводниковые кубиты в настоящий момент являются одной из лидирующих платформ в области квантовых вычислений [1]. При помощи коррекции квантовых ошибок могут быть устранены

вычислительные ошибки, возникающие в результате неконтролируемого взаимодействия кубитов с окружающей средой, поэтому особое внимание необходимо уделять устранению погрешностей на аппаратном уровне, связанных с проектированием чипов [2]. Кубит-трансмон, представляющий собой джозефсоновский контакт, шунтированный большой емкостью для подавления зарядовых флуктуаций, [3] является наиболее распространенным типом сверхпроводниковых кубитов. Двойственным типом для трансмона будет являться квазизарядовый кубит на основе супериндуктивности, в котором подавляются флуктуации потока. Динамика такой системы аналогична движению электрона в кристаллической решетке и может быть описана с помощью функций Блоха [4]. Осцилляции Блоха в джозефсоновском контакте были экспериментально продемонстрированы в [5]. Благодаря этому свойству, квазизарядовый кубит на основе супериндуктивности (известный как «блохниум» [3,4]) оказывается нечувствительным и к зарядовым флуктуациям, являя свое преимущество перед трансмоном.

Любой сверхпроводниковый кубит характеризуется тремя значениями энергий: емкостная — E_C, индуктивная — E_L и джозефсоновская — E_J. Для кубита-блохниума должны выполняться следующие соотношения между этими энергиями: $E_J/E_C \approx 1$ и $E_L/E_C \approx 1/100$ [4]. Варьирование энергии E_J ограничивается снизу минимальной площадью джозефсоновского перехода, который можно изготовить. Возникает необходимость увеличить энергию E_C, что является непростой задачей. На сегодняшний день, единственной экспериментальной реализацией блохниума является работа [4], где для снижения емкости кубит был помещен в трехмерный волновод. Целью данного исследования является реализация блохниума в планарной архитектуре. В данной работе предложен вариант дизайна такого блохниума, построена его эквивалентная электрическая схема (рис. 1), рассчитаны энергии E_J, E_C, E_L. Отличительностью особенностью схемы стало применение гранулированного алюминия, обладающего высокой кинетической индуктивностью, что позволяет выполнить соотношения $E_L/E_C \approx 1/100$, не прибегая изготовлению сложных массивов джозефсоновских контактов [4].

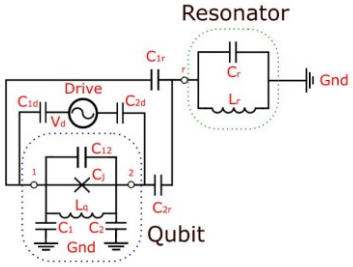


Рис. 1. Эквивалентная электрическая схема кубита-блохниума со считывающим резонатором

Литература

1. *Kjaergaard M.* [et al.]. Superconducting qubits: Current state of play // Annual Review of Condensed Matter Physics. 2020. V. 11. P. 369–395.
2. *Chirolli L.* [et al.]. The quartic Blochnium: an anharmonic quasicharge // arXiv preprint. [2023]. arXiv: 2304.10401v2.
3. *Jens Koch* [et al.]. Charge-insensitive qubit design derived from the cooper pair box. Phys. Rev. A. 2007. V. 76: 042319.
4. *Pechenezhskiy I. V.* [et al.]. The superconducting quasicharge qubit. Nat. 2020. V. 585. P. 368-371.
5. *Shaikhaidarov R. S.* [et al.]. Quantized current steps due to the a.c. coherent quantum phase-slip effect // arXiv preprint. [2022]. arXiv: 2208.05811v2.

УДК 538.945

Измерение спектральной плотности шума сверхпроводникового кубита-флаксониума

***Т. А. Чудакова*[1,2,3]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Российский квантовый центр
[3]Университет науки и технологий МИСиС

Создание отказоустойчивого квантового процессора является важной и сложной задачей в области квантовых технологий. Любые шумы в такой системе разрушают состояние кубита и неизбежно ведут к потери точности гейтов. Поэтому необходимо понимать физические механизмы, приводящие к фазовым

и амплитудным ошибкам. Один из способов исследования декогеренции — это измерение спектральной плотности шума. В данной работе получена спектральная плотность шума кубита-флаксониума с помощью метода блокировки спина во время управляемой эволюции.

Сверхпроводниковый кубит-флаксониум представляет из себя джозефсоновский переход, шунтированный емкостью и большой индуктивностью, реализованной как кинетическая индуктивность массива джозефсоновских контактов. Гамильтониан флаксониума можно записать в следующем виде:

$$H_{Fluxonium} = 4E_C N^2 + E_J\left(1 - \cos\left(\phi - \frac{\Phi_x}{\Phi_0}\right)\right) + \frac{E_L}{2}\phi^2 \quad (1)$$

$$E_L = \frac{{\Phi_0}^2}{(2\pi)^2 L} - \text{индуктивная энергия}$$

$$E_C = \frac{e^2}{2C} - \text{емкостная энергия}$$

$$E_J = \frac{I\Phi_0}{2\pi} - \text{джозефсоновская энергия}$$

Флаксониум является одним из наиболее перспективных видов сверхпроводниковых кубитов. Он обладает большим ангармонизмом, что позволяет реализовывать быстрые операции без утечек из вычислительного пространства; имеет низкую частоту, что уменьшает диэлектрические потери и упрощает схему управления кубитом, также обладает высокой устойчивостью к зарядовым и потоковым шумам [1]. Задача исследования основных механизмов потерь такого типа кубитов является актуальной и важной для создания универсального квантового процессора.

Существует большое количество методов исследования когерентности кубита. В данной работе был выбран метод блокировки спина, так как он позволяет получить спектральную плотность шума в широком диапазоне частот с высокой точностью. Последовательность импульсов для реализации блокировки спина представлена на рис. 1. Первый импульс поворачивает спин на угол -π/2 вокруг оси y, что соответствует расположению вектора состояния вдоль оси x сферы Блоха. Затем подается сигнал некоторой амплитуды и длительности, который блокирует спин. Последний импульс вокруг оси y проецирует состояние на ось z. После этого следует измерение населенности кубита, т.е. проекции на ось z.



Рис. 1. Схема протокола спиновой блокировки

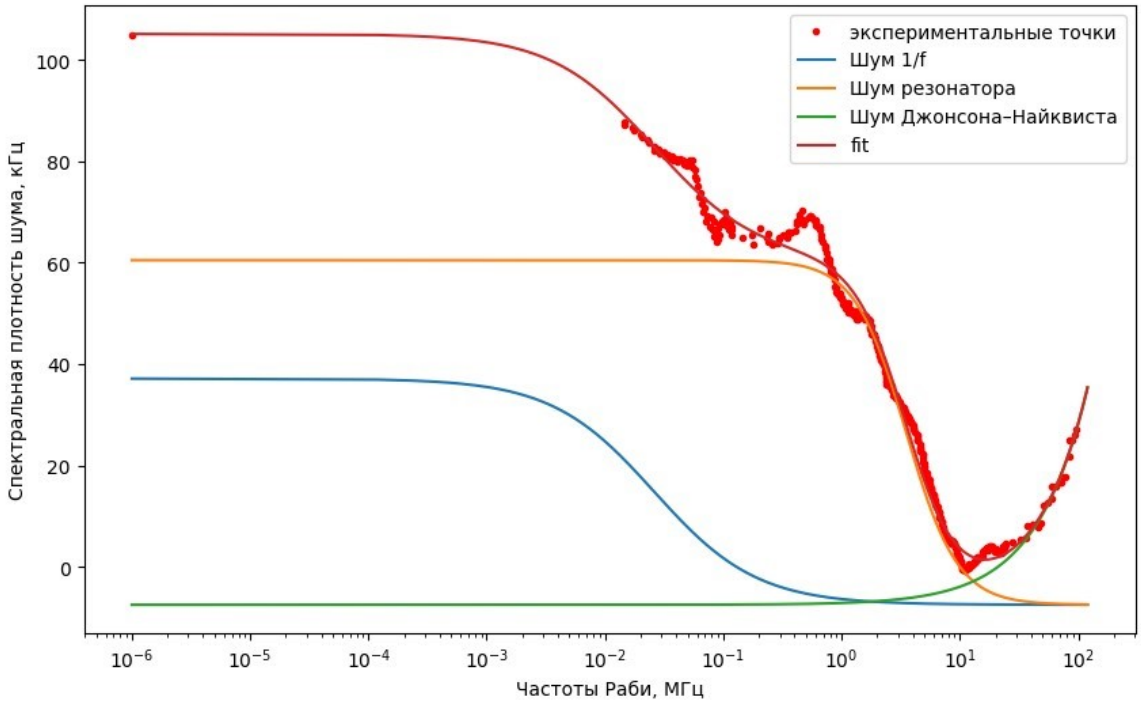


Рис. 2. Спектральная плотность шума кубита-флаксониума

Согласно модели обобщенных уравнений Блоха (GBE) [2], время релаксации T_{1r} управляемого состояния кубита во вращающейся системе определяется формулой:

$$\Gamma_{1r} = \frac{1}{T_{1r}} = \frac{\Gamma_1(\omega_q)}{2} + \Gamma_\Omega(\Omega_R), \quad (2)$$

где $\Gamma_\Omega(\Omega_R)$ отвечает за низкочастотные продольные шумы на частоте Раби Ω_R, в то время как скорость релаксации Γ_1определяется высокочастотным поперечным шумом на частоте кубита ω_q ($\omega_q \gg \Omega_R$) [2]. Соответственно измеряя релаксацию для различных амплитуд сигнала, можно определить спектральную плотность шума.

На рис. 2 представлена полученная спектральная плотность шума в половине кванта магнитного потока. Результаты были сопоставлены со спектрами характерных источников шума для сверхпроводниковых кубитов — низкочастотного 1\f шума, шума термических фотонов в считывающем резонаторе, шума Джонсона-Найквиста [3]. Полученные результаты показывают, что доминирующий вклад в когерентность кубита вносят флуктуации числа фотонов в резонаторе.

Результатом работы стало обнаружение основных дефазирующих каналов для исследуемых кубитов. Определен доминирующий канал потерь. Полученные результаты позволяют определить дальнейшее направление модернизации используемой топологии сверхпроводниковых кубитов-флаксониумов и являются крайне полезными для поиска оптимального контроля их состояния.

Литература

1. *Manucharyan V. E.* [et al.]. Fluxonium: Single cooper-pair circuit free of charge offsets // Science. 2009. V. 326 (5949). P. 113–116.
2. *Yan F.* [et al.]. Rotating-frame relaxation as a noise spectrum analyser of a superconducting qubit undergoing driven evolution // Nat. Commun. 2013. V. 4: 2337.
3. *Yan F.* [et al.]. The flux qubit revisited to enhance coherence and reproducibility // Nat. Commun. 2016. V. 7: 12964.

УДК 53.06

Измерение утечек при проведении однокубитных операций на сверхпроводниковом кубите-трансмоне

***Н. Г. Березкин*[1,2], *Г. С. Мажорин*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Национальный исследовательский технологический университет МИСиС

Точное управление состоянием двухуровневой квантовой системы является ключевым требованием для построения отказоустойчивого квантового процессора. Сверхпроводниковый кубит является многоуровневой квантовой системой, в которой основное состояние $|0\rangle$ и первое возбужденное состояние $|1\rangle$ образуют базис вычислительного подпространства. Наличие остальных невычислительных уровней приводит к тому, что при управлении кубитом с помощью микроволновых импульсов конечной длительности имеют место утечки населенности за пределы вычислительного подпространства, прежде всего, во второе возбужденное состояние $|2\rangle$.

В работе исследуется трансмон с частотой $\omega_{01} = 5{,}36$ ГГц и ангармонизмом $\alpha = -0{,}17$ ГГц, временем релаксации $T_1 = 21$ мкс, временем когерентности $T_2 = 17$ мкс. Тестирование однокубитных операций производилось на вентилях из группы Клиффорда. Каждую операцию из однокубитной группы Клиффорда можно представить в виде композиции нескольких поворотов на сфере Блоха, являющихся естественными в экспериментах со сверхпроводниковыми кубитами — это либо вращение на угол $\pi/2$ вокруг оси X ($X_{\pi/2}$), либо виртуальное вращение на угол $\pi/2$ вокруг оси Z ($Z_{\pi/2}$). В эксперименте использовались $\pi/2$-импульсы с гауссовой огибающей, длительностью 20 нс и дисперсией, составляющей одну четвертую часть длительности импульса (5 нс). Предварительно была проведена численная симуляция эволюции состояния кубита под действием гауссова импульса. Использовалась трехуровневая модель с релаксацией, в которой эволюция матрицы плотности системы $\hat{\rho}$ описывается уравнением Линдблада:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\left[\hat{H}(t), \hat{\rho}\right] + \sum_{i,j} \hat{L}_i^j \, \hat{\rho} (\hat{L}_i^j)^\dagger - \frac{1}{2}\{(\hat{L}_i^j)^\dagger \hat{L}_i^j, \hat{\rho}\} \quad (1)$$

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_q + I(t)\hat{\Phi}, \quad (2)$$

где $\widehat{H}_q$ — гамильтониан трансмона в диагональном представлении, $I(t)$ — управляющий токовый импульс с гауссовой огибающей, $\widehat{\Phi}$ — оператор магнитного потока. Суммирование в формуле (1) идет по каналам релаксации и возбужденным состояниям: $\hat{L}_1^j$ — операторы энергетической релаксации, $\hat{L}_2^j$ — операторы чистой дефазировки для состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (j = 1, 2). Численно были получены зависимости населенностей состояний $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ от времени и амплитуды управляющего импульса (рис. 1). Для вычисления матрицы вентиля $X_{\pi/2}$, учитывающей утечки в трехуровневой системе, уравнение (1) было решено для трех начальных условий, соответствующих приготовлению кубита в состояниях $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$.

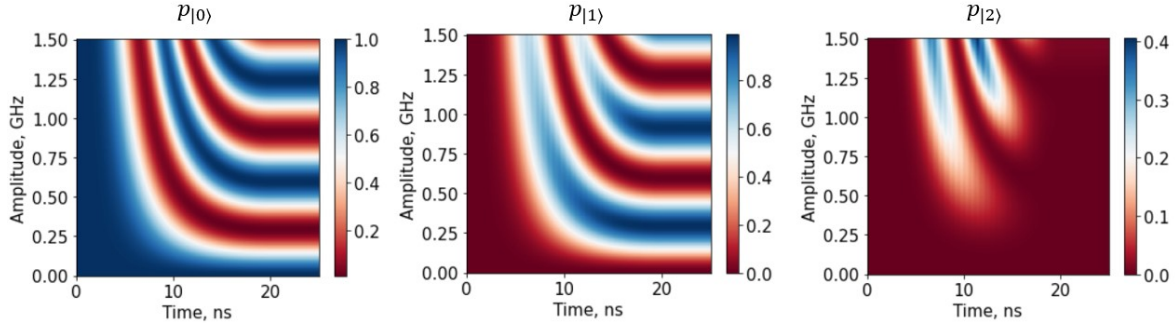


Рис. 1. Численные зависимости населенностей состояний $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ от времени и амплитуды управляющего импульса с начальным условием, когда кубит приготовлен в состоянии $|0\rangle$. Аналогично, зависимости от времени и амплитуды управляющего импульса были получены для остальных начальных условий

В работе предложен и экспериментально реализован метод измерения утечек из вычислительного подпространства, основанный на считывании состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Были заданы случайные клиффордовские последовательности, длина m которых достигала 600 вентилей, для каждой длины m генерировались 50 последовательностей, по которым затем производилось усреднение результатов измерений. На первом этапе поочередно выполнялись сгенерированные случайные последовательности, после выполнения каждой случайной последовательности на кубит подавался считывающий импульс. Таким образом измерялась населенность состояния $|0\rangle$ в зависимости от длины последовательности m. На втором этапе выполнялся тот же набор последовательностей, и после выполнения каждой из них на кубит подавался π-импульс, после которого следовал считывающий импульс. Таким образом измерялась населенность состояния $|1\rangle$ в зависимости от длины последовательности m. Для вычисления значения утечки в зависимости m измеренные населенности состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ умножались на матрицу ошибок считывания, затем их сумма вычиталась из полной населенности кубита, равной единице.

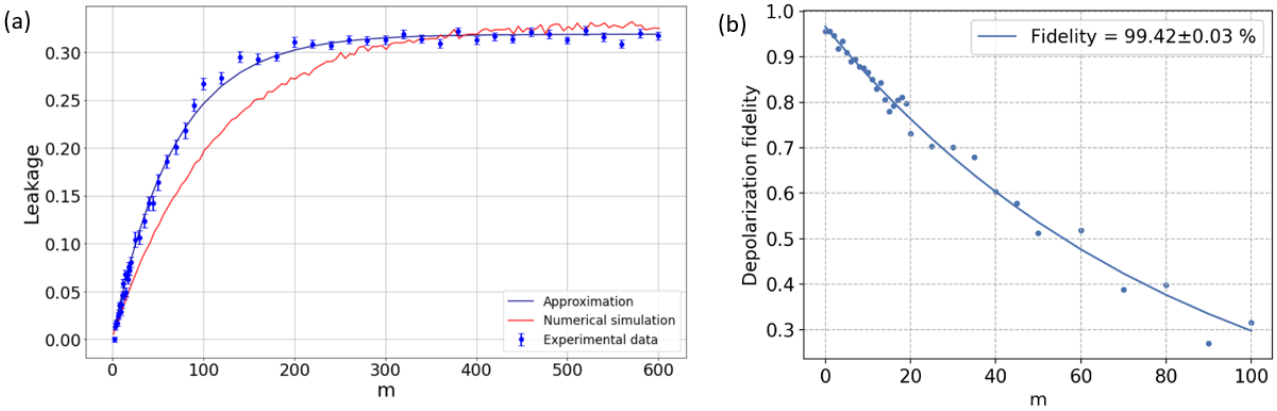


Рис. 2. Зависимость утечки от длины клиффордовской цепочки (*a*), синими точками показаны результаты измерений, синей линией показана их аппроксимация по формуле (3), красной линией показан результат симуляции, основанной на решении уравнения (1); аппроксимация результатов перекрестно-энтропийного тестирования (*b*)

Для интерпретации результатов измерений и количественной оценки скорости утечки на один клиффордовский вентиль использовалось уравнение кинетики, описывающее утечку из вычислительного подпространства в состояние $|2\rangle$ и распад состояния $|2\rangle$ обратно в вычислительное подпространство [1]:

$$p_{|2\rangle}(m) = p_\infty\left(1 - e^{-\Gamma m}\right) + p_0 e^{-\Gamma m}, \quad (3)$$

$$\Gamma = \gamma_\uparrow + \gamma_\downarrow, \;\; p_\infty = \frac{\gamma_\uparrow}{\Gamma}, \quad (4)$$

где $p_{|2\rangle}(m)$ — населенность состояния $|2\rangle$, $\gamma_\uparrow$ и $\gamma_\downarrow$ — скорости утечки и распада на один клиффордовский вентиль, p_0 — начальная населенность состояния $|2\rangle$. Результаты измерений и численной симуляции изображены на рис. 2*a*. Аппроксимация экспериментальных данных по формуле (3) дает скорость утечки $(47 \pm 1) \cdot 10^{-4}$. Численная симуляция эксперимента, основанная на решении уравнения (1) и аппроксимации по формуле (3), дает скорость утечки $(33{,}6 \pm 0{,}1) \cdot 10^{-4}$.

По результатам проведенных измерений определена точность (Fidelity) однокубитных операций методом перекрестно-энтропийного тестирования (Cross Entropy Benchmarking), данный метод описан в работе [2]. Точность составила $99{,}42 \pm 0{,}03$ % (рис. 2*b*).

Литература

1. *Chen Z.* [et al.]. Measuring and Suppressing Quantum State Leakage in a Superconducting Qubit // Physical Review Letters. 2016 V. 116 (2): 020501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.020501.
2. *Arute F.* [et al.]. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor // Nature. 2019. V. 574(7779). P. 505–510.

UDC 530.145

Comparing impacts of gate merging and frame dimension increasing for negativity minimization in overcomplete quasiprobability representations

***D. A. Kulikov*[1,2], *V. I Yashin*[2,4], *E. O. Kiktenko*[2,3,4], *A. K. Fedorov*[2,3]**

[1] Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)
[2]Russian Quantum Center
[3]National University of Science and Technology “MISIS”
[4]Mathematical Institute. V. A. Steklov of the Russian Academy of Sciences

The problem of classical simulation of quantum system dynamics is important for understanding of the possible advantage of quantum devices over the classical ones. However, the nature of this advantage is an open question. There are several candidates on the role of resource for quantum advantage. The most promising one is the negativity [1], because it seems to be the most natural and general resource since it applies to any quasiprobability representation of quantum mechanics.

Quasiprobability representation is an approach to description of quantum dynamics via quasistochastic matrices acting on quasiprobability distributions. Quantum circuits can be classically simulated using Monte Carlo methods. However, the effectiveness of the simulation is determined by the amount of negativity in the representation [2].

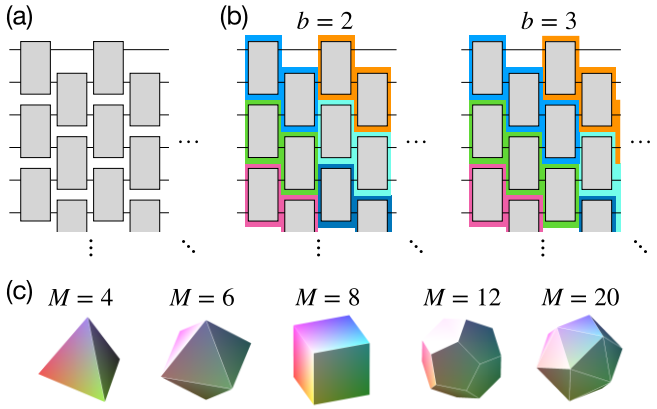


Fig. 1. In (*a*) the brick-wall structure of the considered random circuit is shown. Each two-qubit unitary is independently sampled according to the Haar measure. An application of each two-qubit unitary is accompanied by depolarizing noise of strength p acting on affected qubits. In (*b*) the idea of gate merging for $b = 2$ and 3 is demonstrated. Two-qubit channels in blocks of the same color are multiplied together to obtain $(b + 1)$-qubit channels. In (*c*) the list of regular polyhedrons used for constructing symmetric single-qubit frames is presented.

The same quantum circuit can have different negativity in different quasiprobability representations. It is possible to find optimal representation of the given dimension. Moreover, the amount of negativity decreases

with the growth of representation dimensionality [3]. However, representations of higher dimensionality require more computational resources.

In current work we examine another approach to decreasing the circuit negativity. Namely, gate merging. We consider a chain of qubits affected by a number of noisy two-qubit gates applied within a brick-wall pattern. Among with varying the form of the representation we join gates together and considering negativity of composite blocks. The framework is shown in Fig. 1.

The main result of our work is the demonstration of trade-off between increasing representation dimensionality and gate merging according to amount of classical memory to store quasistochastic matrices of the given circuit. This relation is shown in Fig 2.

The work was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 19-71-10091.

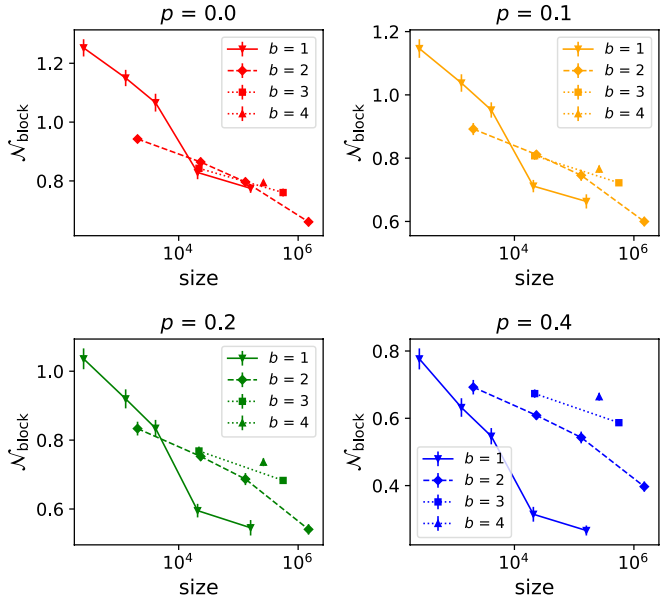


Fig. 2. The normalized single-block negativity $\mathcal{N}_{block}(M,b,p)$as functiton of $size(M.b)$ for different configurations of regular frame dimension M, block size b, and strength of depolarization p. The limitation on the normalized number of elements in the resulting quasi-stochastic matrices $size(M,b) < 3 \times 10^6$is considered. Vertical lines denote a standard deviation among the processed data.

References

1. *Veicth V.* [et al.]. Negative quasi-probability as a resource for quantum computation // New J. Phys. 2012 V. 14: 113011.
2. *Koukoulekidis N.* [et al.]. Faster Born probability estimation via gate merging and frame optimization // Quantum 2022 V. 6: 838.
3. *Kulikov D. A.* [et al.]. Minimizing the negativity of quantum circuits in overcomplete quasiprobability representations // Physica Review A. 2024. V. 109(1): 012219

UDC 538.9

Fluctuating local field approach for description of the dynamics of closed systems of correlated fermions

***L. D. Silakov*[1,2], *A. N. Rubtsov*[2], *Ya. S. Lyakhova*[1,2]**

[1]National Research Nuclear University MEPhI
[2]Russian Quantum Center

A lot of correlated systems like a non–standard superconductors [1], spin liquids [2], Fermi atoms in optical lattice [3] and etc. can be, to some extent, described via the Hubbard model [4]. Many examples of using this model in stationary case are known to date, but there are no clear examples of its use in dynamics. In our work we present the scheme of fluctuating local field approach (FLF) in non-stationary case. In the simplest case, this model can be described by the Hamiltonian:

$$\hat{H} = -t\sum_{J,\sigma}(c^{\dagger}_{J+x,\sigma}c_{J,\sigma} + c^{\dagger}_{J+y,\sigma} + h.c.) + U\sum_{J}\left(n_{J\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{J\downarrow} - \frac{1}{2}\right) - h\sum_{J}(n_{J\uparrow} - n_{J\downarrow}). \quad (1)$$

Here U is the on-site interaction between $\sigma = \uparrow$ and $\sigma = \downarrow$ spin projections, h is the external field, t is the hoppings amplitude between nearest neighboring sites, and the superindex J denotes the position of the particular site in the lattice (j_x, j_y) and $J + x$ means (j_x+1, j_y).

As the first step we compare numerically exact solution for 2×4 lattice with the mean field solution (MF). The MF Hamiltonian reads:

$$\hat{H}_{MF} = -t\sum_{J,\sigma}(c^{\dagger}_{J+x,\sigma}c_{J,\sigma} + c^{\dagger}_{J+y,\sigma} + h.c.) + \sum_{J} h_J^{eff}(n_{J\uparrow} - n_{J\downarrow}), \quad (2)$$

$$h_J^{eff} = h + \frac{U}{2}\langle n_{J\uparrow} - n_{J\downarrow}\rangle_{MF} \quad (3)$$

The initial state is the half-filled antiferromagnetically ordered lattice, which corresponds to the Mott insulator. We solve the Schrodinger equation for both $\hat{H}$ and $\hat{H}_{MF}$:

$$-i\frac{d|\psi\rangle}{dt} + H|\psi\rangle = 0. \quad (4)$$

Here and in the following we set $\hbar = m = 1$. It can be seen from (Fig. 1.) that the MF approximation incorrectly describes the evolution of the system using the example of calculating magnetization $M = \langle n_{J\uparrow} - n_{J\downarrow}\rangle$. Namely, the MF approach selects the order parameter in an uncontrolled manner and fixes it, thus not taking into account local correlations at sites and collective fluctuations in the lattice.

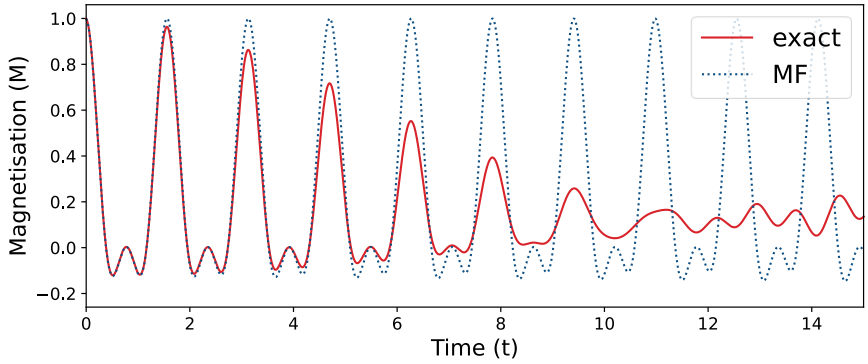


Fig. 1. Evolution of magnetization M for exact and MF solutions. Parameters of this system: $\frac{U}{t} = 0.1, \frac{h}{t} = 0.1$

As the next step we apply the fluctuating local field approach (FLF) [5, 6]. Based on this method we introducing fluctuating field $\vec{h}$ and consider the ensemble of states with particular $\vec{h}$. Then, in this approach the state of the system can be described by state-vector $|\psi^{FLF}\rangle = \int |\psi^0_{\vec{h}}\rangle f(\vec{h}) d^3h$ averaged over some distribution function $f(\vec{h})$. Here $|\psi^0_{\vec{h}}\rangle$ is the ground state of $\hat{H}_{MF}$ with the particular value of $\vec{h}$. Next, we minimize the energy of the system to define the distribution function $f(\vec{h})$ as follows:

$$\mathcal{E}\left[f(\vec{h})^*\right] = \langle\psi^{FLF}|\hat{H}_{MF}|\psi^{FLF}\rangle = \iint f(\vec{h}')\, f(\vec{h})^* \langle\psi^0_{\vec{h}'}|\hat{H}_{MF}|\psi^0_{\vec{h}}\rangle\, d^3h'\, d^3h, \quad (5)$$

$$\delta\tilde{\mathcal{E}}\left[f(\vec{h})^*\right] = \iint [\langle\psi^0_{\vec{h}'}|\hat{H}_{MF}|\psi^0_{\vec{h}}\rangle - E] f(\vec{h}')\, f(\vec{h})^*\, d^3h'\, d^3h = 0, \quad (6)$$

$$H_{\vec{h}'\vec{h}} f(\vec{h}') = E I_{\vec{h}'\vec{h}} f(\vec{h}'). \quad (7)$$

Here E is the Lagrange multiplier, $I_{\vec{h}'\vec{h}} = \langle\psi^0_{\vec{h}'}|\,\psi^0_{\vec{h}}\rangle$. In the next step we rewrite equation (4) in the variational form

$$\delta|\psi^{FLF}\rangle = \frac{\delta t}{i} H|\psi^{FLF}\rangle, \quad (8)$$

and solve the evolution equation in FLF terms. Introduce the projector $R_{\tilde{h}h'} = \langle\psi_{h'}|\psi_{\tilde{h}}\rangle^{-1}$, and $\langle\psi_{h'}|R_{\tilde{h}h'}|\psi_{\tilde{h}}\rangle = I$. We plug this into the equation (8):

$$\delta|\psi^{FLF}\rangle = \frac{\delta t}{i} H \int |\psi_{\tilde{h}}\rangle R_{\tilde{h}h'}\langle\psi_{h'}|H|\psi_{\vec{h}}\rangle\, f_{\vec{h}}(t)\, d^3h. \quad (9)$$

Finally, we reduced the dynamics equation to the variational equation w.r.t. the distribution function $f_{\vec{h}}(t)$:

$$\delta f_{\tilde{h}}(t) = \frac{\delta t}{i} R_{\tilde{h}h'} H_{h'h} f_h(t). \quad (10)$$

We expect to use the FLF approach to describe not only oscillatory dynamics, but also the decay of oscillations of collective degrees of freedom.

Bibliography

4. *Mackenzie A. P., Maeno Y.* The superconductivity of Sr_2RuO_4 and the physics of spin-triplet pairing // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75(2). P. 657–712.
5. *Lee P. A., Nagaosa N., Wen X. G.* Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity // Rev. Mod. Phys. 2006. V. 78(1). P. 17–85.
6. *Bakr W.* [et al.]. A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice // Nature. 2009. V. 462(7269). P. 74–77.
7. *Hubbard J.* Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case // Proc. R. Soc. London, Ser. A. Mathematical and Physical Sciences. 1964. V. 277(1369). P. 237–259.
8. *Rubtsov A. N.* Fluctuating local field method probed for a description of small classical correlated lattices // Phys. Rev. E. 2018. V. 97(5): 052120.
9. *Lyakhova Ya. S., Rubtsov A. N.* Fluctuating local field approach to the description of lattice models in the strong coupling regime // J. Supercond. Novel Magn. 2022. V. 35(8). P. 2169–2173.

UDC 53.06

Decoherence effect on the two-qubit entanglement of 40Ca+ ions

***N. A. Sterligov*[1,3], *N. V. Morozov*[1,2], *L. A. Akopian*[1,3], *A. N. Matveev*[1], *O. Y. Lakhmanskaya*[1], *K. E. Lakhmanskiy*[1,3]**

[1]Russian Quantum Center
[2]National Research Nuclear University MEPhI
[3]Moscow Institute of Physics and Technology

Quantum computing is a cutting-edge technology with the potential to completely transform various fields like cryptography, drug discovery, and optimization problems. Among the different platforms being explored, trapped ions stand out as one of the most promising due to their ability to establish connections between all ions, high levels of accuracy, and long coherence times. In such quantum computers, linear chains of ions are confined within an electromagnetic Paul trap [1]. Each ion's specific electronic states are utilized as a qubit, which can be manipulated using laser pulses.

While significant progress has been made in accurately operating single qubits with high fidelity, achieving high-quality entanglement between two qubits within large ion chains remains a challenging task.

The entanglement is typically achieved using the Mølmer-Sørensen technique (MS gate), which involves bichromatic laser pulses to entangle the electronic states of two chosen ions. This entanglement occurs through the virtual excitation of common mode phonons. One key benefit of the gate is its ability to maintain entanglement even at finite ion temperature. The propagator

$$U = \exp(-i\frac{\pi}{4}\sigma_x^1\sigma_x^2) \quad (1)$$

is realized given the gate duration and Rabi frequency satisfy the relations

$$\tau = \frac{2\pi}{|\mu-\omega|}, \Omega = \frac{|\mu-\omega|}{2\eta}, \quad (2)$$

where η — Lamb-Dicke parameter, μ — detuning of the bichromatic field, Ω — Rabi frequency, τ^{τ} — gate duration, ω — frequency of normal center of mass (COM) mode.

Here we perform the MS gate on two 40Ca+ ions trapped in a linear Paul trap with axial trap frequency ν = 591 kHz. We use the quadrupole transition S1/2, m = -1/2 ↔ D5/2, m = - 1/2 at a wavelength of 729 nm as a qubit transition due to it's insensitivity to magnetic field fluctuations. We entangle ions using global addressing along trap axis and with the power of laser beams entering the vacuum chamber of about 80 mW. The polarization of the beam is set to maximize the ion-light coupling for Δm = 0. In particular, we achieve Rabi frequency

$\Omega/2\pi$ = 81 kHz. MS gate is realized using a bichromatic laser beam detuned from the quadrupole qubit S-D transition by $\delta = \pm$ 605 kHz resulting in gate time τ = 69 μs. The ions were cooled to the mean phonon number of n = 0.02. Fig. 1 illustrates the population evolution induced by the gate pulse for ions initially prepared in a state $|00\rangle$ and parity oscillations [3] for the produced Bell state.

The obtained fidelity of 91.7(3)% (including SPAM errors) is mostly limited by frequency-phase fluctuations of the qubit titanium sapphire laser and magnetic field fluctuations. To characterize the decoherence of our system we conduct the Ramsey experiment [4] on quadrupole S1/2, m = –1/2 ↔ D5/2 transitions with Δm = {0,-2,2}. We consider the model of stationary Gaussian noise with exponentially decaying correlation function. Hence, inverse decoherence time depends linearly on the magnetic field sensitivity [4]. Fig. 2 shows the linear fit of inverse coherence times with respect to magnetic field sensitivity as well as coherence decay for qubit transition. The value of the fitted line in the point where it intercepts the Y-axis corresponds to the decoherence due to laser phase-frequency fluctuations. For the qubit transition, the coherence time is 95(4) $t = 95(4)$μs while the contribution of laser imperfection is 97(5) $t = 95(4)$ μs. Thus, in order to improve our results the laser frequency-phase fluctuations have to be corrected.

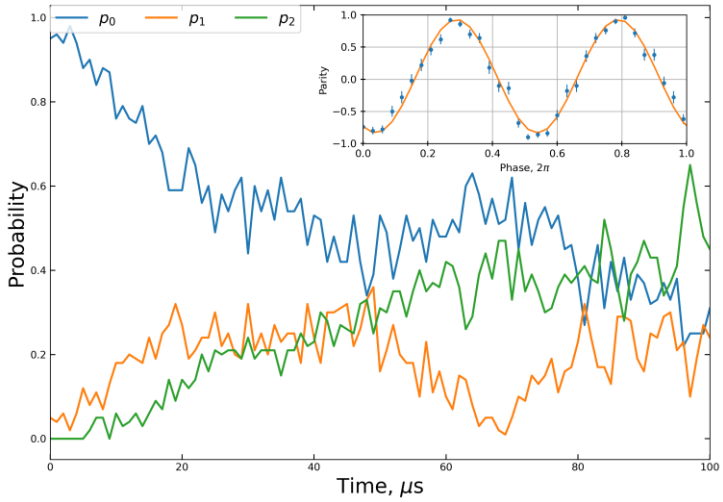


Fig. 1. Measured populations evolution for p0, p1 and p2 and parity oscillation at the time of maximum entanglement. Populations are labeled accodring to the number of ions fluorescing

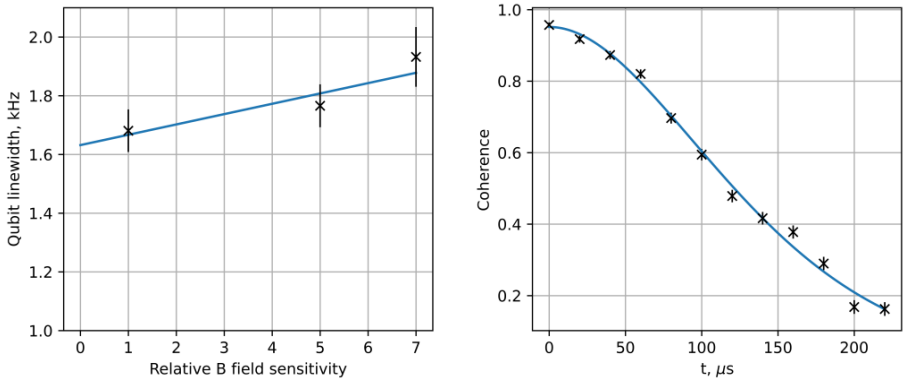


Fig. 2. (left): qubit linewidth as a function of relative magnetic field sensitivity; (right): coherence of a qubit transition with Δm = 0 as a function of time for a single qubit

References

1. *Pogorelov I.* [et al.] Compact ion-trap quantum computing demonstrator // PRX Quantum. 2021. V. 2. P. 20343–20366.
2. *Sorensen A., Molmer K.* Quantum computation with ions in thermal motion // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 1971–1974.
3. *Kirchmair G.* [et al.] Deterministic entanglement of ions in thermal states of motion // New Journal of Physics. 2009. V. 11(2). P. 23002–23021.
4. *Monz T.* [et al.] 14-qubit entanglement: Creation and coherence // Physical Review Letters. 2011. V. 106(13). P. 130506–130510.

УДК 53.06

Program package for simulation and analysis of ion crystals in surface electrode traps

A. Podlesnyy, Y. Suleimen, L. Mazhorina, K. Lakhmanskiy

Russian Quantum Center

Cold ions, confined in the radio-frequency (RF) electrode traps, are one of the most promising platforms for practical realization of quantum computer (QC). Several approaches have emerged for scaling the trapped-ion qubit system, such as the use of intrinsic properties of ions in the long chains (qudits, mixed-species ion crystals), spectral separation in single or multiple 3D ion traps (optical tweezers, photonic interconnects) and quantum charged-coupled device architecture (QCCD). The latter manifests in the use of surface electrode traps (SETs) — planar microchips with electrodes, embedded on the chip's surface, confining ions above the plane (Fig.1). The simplicity of production allows to create complicated arrays of electrodes for precise control of the ion positions in the crystal and potential, experienced by them, and, consecutively, properties of ion qubits and their interactions.

However, these arrays of electrodes lead to the inability to perform fully analytical description of the researched trap. The potential expression above the electrode of given shape is determined from the solution of Laplace equation with provided boundary conditions. In particular, for rectangular electrode i with voltage V_i, the potential is given as follows:

$$\phi_i(x,y,z) = \frac{V_i}{2\pi}\left\{ \begin{array}{l} \tan^{-1}\left[\frac{(x_{i2}-x)(z_{i2}-z)}{y\sqrt{y^2+(x_{i2}-x)^2+(z_{i2}-z)^2}}\right] - \tan^{-1}\left[\frac{(x_{i1}-x)(z_{i2}-z)}{y\sqrt{y^2+(x_{i1}-x)^2+(z_{i2}-z)^2}}\right] \\ -\tan^{-1}\left[\frac{(x_{i2}-x)(z_{i1}-z)}{y\sqrt{y^2+(x_{i2}-x)^2+(z_{i1}-z)^2}}\right] + \tan^{-1}\left[\frac{(x_{i1}-x)(z_{i1}-z)}{y\sqrt{y^2+(x_{i1}-x)^2+(z_{i1}-z)^2}}\right] \end{array} \right\}, \quad (1)$$

where index $i1/2$ denotes opposite-side coordinates of the rectangular electrode on the xz plane. For purposes of QC, one must consider at least several ions, since a single trapped ion, in most cases, represent a single qudit. The equations of motion in $l = x, y, z$ axes of $i = 1..N$ charged particles in the surface trap with $k = 1..M$ electrodes with the presence of laser cooling force with cooling rate γ are given by:

$$m_i \ddot{x}_l^i = \frac{\partial}{\partial x_l^i}\left(\sum_{k=1}^{M} \phi_k\left(x_l^i, t\right) + \sum_{i_1=1}^{N}\sum_{i_2>i_1}^{N} \frac{Z_{i_1} Z_{i_2} e^2}{4\pi\epsilon_0 \left|\sqrt{\sum_{l=1}^{3}\left(x_l^{i_1}-x_l^{i_2}\right)^2}\right|} \right) - \gamma \dot{x}_l^i + f(t). \quad (2)$$

Here, the stochastic force $f(t)$ is introduced to account for the finite temperature of ion crystal under Doppler cooling sequence.

An ideal base for trapped-ion quantum computer is a fully stable Coulomb crystal — a linear chain of ions, confined in a harmonic potential and cooled to the ground state. Then, a sequence of laser beams, individually addressed to each ion in the crystal, is used to control the state of the quantum register, utilizing the spin-motion coupling, inherent to ultra-cold ions. This coupling is controlled by exciting specific normal modes — linearized harmonic oscillations of ions in the crystal. The potential of SET is, however, non-harmonic. Nevertheless, in the cold regime the ions oscillate only in small region around their equilibrium positions $x_i^n(0)$, defined by ion's packet wavelength (typically <20 nm for Ca ion). This allows to consider the potential harmonic in the vicinity of $x_i^n(0)$. The potential energy from (2) is then expanded in Taylor series up to the fourth order of deviations of ion coordinates $x_i^n(t)$. The normal modes are then derived from linearization of hessian $H^{(2)}$. Additionally, when small, the anharmonic shifts to normal modes are derived from linearization of the full expanded potential.

Conclusively, a set of properties, describing the future performance of QC from the point of view of ion-trap complex, is derived: stability of ion motion in the given trap, confinement of ions with finite temperature and magnitude of cooling force (γ), coordinates of equilibrium ion positions in the crystal, normal mode spectrum, and, finally, anharmonic effects — deviations from ideal harmonic potential in realistic experimental setup. In addition to aforementioned points, the following considerations must be taken into account specifically for SETs. The use of QCCD architecture requires an ability to perform shuttling operations on ions: physical transport of ions along the surface trap, as well as rotating and splitting/merging of several ions (usually ion pairs). This leads to the necessity of voltage optimization on the arrays of electrodes to perform the shuttling operations with minimized motional excitation and risk of ion loss.

The *Sion* package is developed to tackle the problem of designing surface ion traps for effective control of ion crystals. This package covers all of the aforementioned steps for developing the electrode layout, required for

high-performance trapped-ion QC. The dependencies for this Python package: *electrode* [1] — simulation of potential distribution above arbitrary planar traps, *pyLion* [2] — package for molecular dynamics (MD) simulation of charged particles in harmonic 3D Paul traps. The general workflow of surface trap development with *Sion* is demonstrated on Fig.1. The figures demonstrate the development of a T-junction trap — a basic element of QCCD architecture. A mixed species ion crystal, confined within the storage region is fully characterized, as well as a shuttling simulation of a Ca ion transport through the junction.

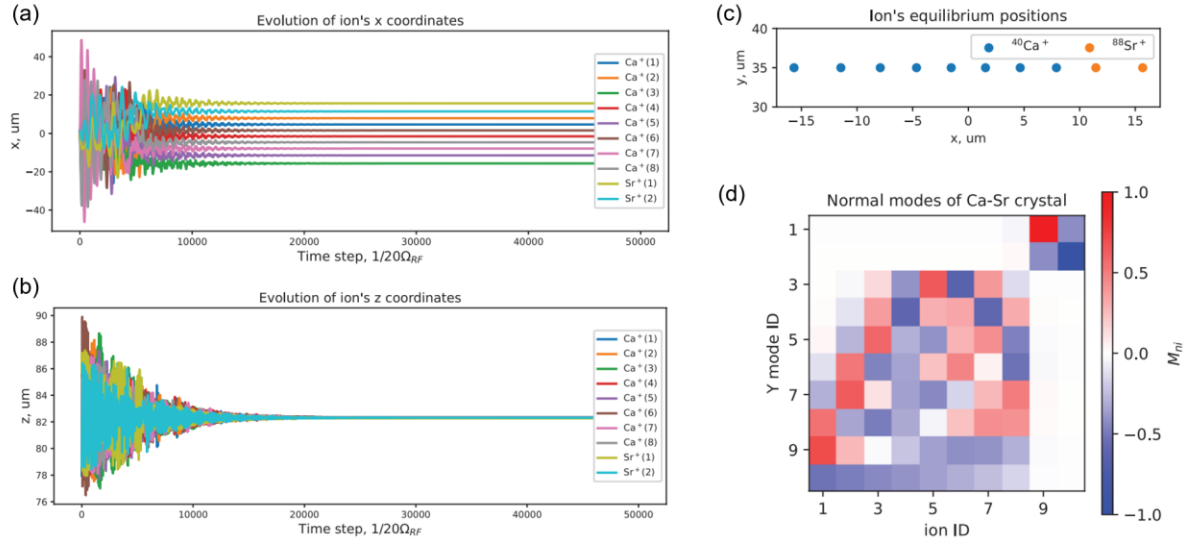


Fig. 1. Simulation of a mixed Ca-Sr ion crystal in the polygon-electrode planar trap: *a* — simulation of the ions motion in axial-x direction; *b* — simulation of ion motion in vertical-z direction; *c* — resulting mixed species ion crystal; *d* — normal mode interaction matrix in radial-y direction. ID = {1-8} correspond to Ca ions, ID = {9-10} correspond to Sr ions

In summary, *Sion* package's key features include:

1. Simple initialization and characterization of an arbitrary SET.
2. Simulation of ion dynamics in and arbitrary-shaped SET by MD method.
3. Stability analysis of SET for mixed-species ion crystals.
4. Calculation of harmonic normal modes for a crystal of arbitrary configuration. This includes spatially non-linear crystals of ions with different charges and masses, and configurations of individual spectral frequencies, induced by arrays of microtraps or optical tweezers.
5. Calculation of anharmonic frequency shifts to normal modes.
6. Optimization of voltage sequences for ion shuttling along an arbitrary transport route.
7. Simulation of SETs with arbitrary voltage sequences on electrodes.
8. Optimization of dc voltages for the construction of desired secular frequency spectrum.

This package serves an important part in designing and researching surface electrode traps. The results, obtained with this package, include an article [3], three scientific reports of the research group as a part of Russian Roadmap for Quantum computing and a result of intellectual activity [4]. The publication of the package is going to impact the future research in the field of planar ion trapping, increasing the effectiveness of surface trap design and control of ion crystals within it.

This work was supported by Rosatom in the framework of the Roadmap for Quantum computing (Contract No. 868-1.3-15/15-2021 dated October 5).

References

1. Numerical tools for RF ion traps // GitHub : [Электронная платформа]. URL: https://github.com/nist-ionstorage/electrode (дата обращения: 26.02.2012).
2. *Bentine E., Foot C. J., Trypogeorgos D.* (py)LIon: A package for simulating trapped ion trajectories // Comp. Phys. Comm. 2020. V. 253: 107187.
3. *Suleimen Y.* [et al.]. Surface trap with adjustable ion couplings for scalable and parallel gates // Phys. Rev. A. 2024. V. 109(2): 022605.
4. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2023668089. Российская Федерация. Программа численного моделирования поверхностной ловушки на один ион / К. Е. Лахманский, А. С. Подлесный, Е. Сулеймен; № 2023668089; заявл. 17.08.2023; опубл. 23.08.2023.

UDC 538.941

Superfluid transition of disordered dipolar Fermi gases in a 2D lattice

V. Y. Pinchenkova[1,2], *S. I. Matveenko*[3,2], *G. V. Shlyapnikov*[1,2,4,5]

[1]Moscow Institute of Physics and Technology
[2]Russian Quantum Center
[3]L. D. Landau Institute for Theoretical Physics
[4]Université Paris-Saclay, CNRS, LPTMS
[5]Van der Waals–Zeeman Institute, Institute of Physics, University of Amsterdam

Possibilities to manipulate the superfluid transition temperature in Fermi gases rely on varying the external confining potential, in particular by introducing a disorder. However, in a weak disorder (such that $k_F l \gg 1$, where k_F is the Fermi momentum, and l is the mean free path) in the case of a weak short-range interaction where the interaction amplitude is momentum independent, the Anderson theorem indicates that the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) transition temperature does not depend on the disorder [1, 2]. The situation drastically changes for Fermi gases of dipolar particles, where the interaction amplitude is momentum dependent and the Anderson theorem is violated [3]. The transition temperature in the weakly interacting regime can be strongly increased by a weak disorder [3], although an increase in the interaction strength decreases the influence of disorder and in the strongly interacting regime this influence practically vanishes [4].

In this work we consider two-component dipolar fermions in the two-dimensional (2D) lattice with a weak on-site disorder, assuming that the dipole moments are perpendicular to the lattice. In the 2D geometry, the temperature for the onset of superfluidity T_c is set by the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) mechanism. However, in the weakly interacting regime, the BKT transition temperature is very close to T_c calculated in the mean-field BCS approach. The renormalized BCS gap equation averaged over the disorder is

$$1 = -\int \frac{k\,dk}{2\pi} f(k, k_F)\left[K(k) - \frac{1}{2(E_k - E_F)}\right], \tag{1}$$

with the function $K(k)$ being

$$K(k) = \frac{i}{2\pi}\frac{\Psi\left(\frac{1}{2} - \frac{i\left(\xi_k + i/(2\tau_e)\right)}{2\pi T_c}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right)}{\xi_k + i/(2\tau_e)} + \text{h.c.}, \tag{2}$$

where $f(\mathrm{k}, \mathrm{k}')$ is the s-wave fermion-fermion scattering amplitude, $E_k = \frac{k^2}{2m_*}$, $\xi_k = E_k - E_F$, E_F is the Fermi energy, m_* is an effective particle mass in a lattice, Ψ is the digamma function, τ_e is the time between disorder-induced elastic collisions in the Born approximation, and we put $\hbar = 1$.

The s-wave scattering amplitude in 2D dipolar Fermi gases reads $\mathrm{f}(\mathrm{k}', \mathrm{k}) = \mathrm{F}_0 + \mathrm{f}_{\mathrm{dd}}(\mathrm{k}', \mathrm{k})$. The first term F_0 comes from the short-range contact interaction. The second term comes from the long-range dipole-dipole interaction. It was shown that in a sufficiently deep lattice (tight-binding limit) and low momentum limit that we consider, the momentum dependent dipole-dipole part of the scattering amplitude in the lattice is the same as in free space but with replacement the atom mass m with the effective mass m_* [5]. Its s-wave part in the Born approximation is given by

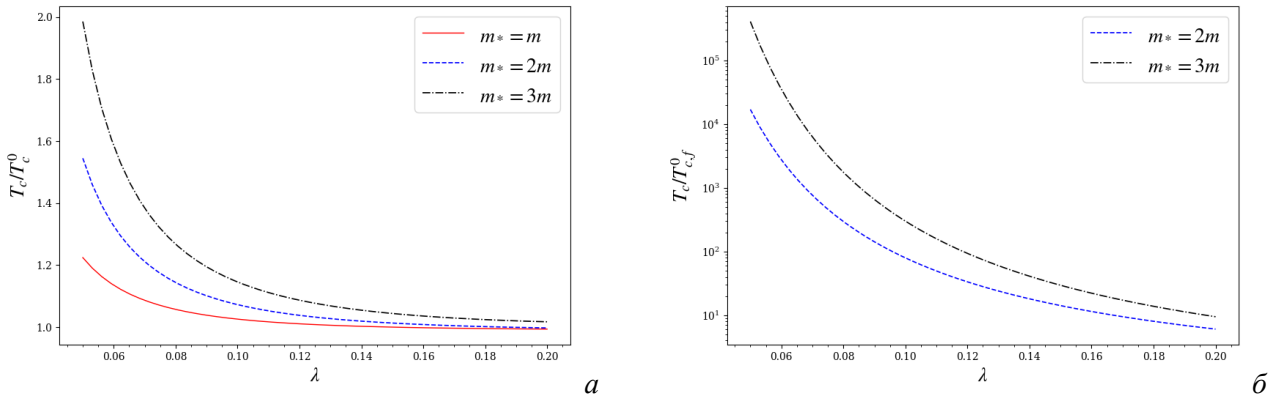
$$f_{dd}(k', k) = \int_0^\infty [J_0(k'r)J_0(kr) - 1]V_{dd}(r)2\,\pi r dr = -2\pi d_0^2 k F\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, \frac{k'^2}{k^2}\right), \tag{3}$$

where J_0 is the Bessel function, F is the hypergeometric function, $V_{dd}(r) = \frac{d_0^2}{r^3}$ is the dipole-dipole interaction potential, and d_0 is the dipole moment. The Born approximation requires the condition $k r_*^l \ll 1$ with $r_*^l = m_* d_0^2$ being the so-called dipole-dipole distance in the lattice, and the result (3) is written for $k' < k$. For $k' > k$ one should interchange k' and k.

Figure 1.a shows the numerical solution of the gap equation (1) for the ratio of the critical temperature T_c in the lattice with disorder to the critical temperature T_c^0 in the lattice without disorder. Figure 2.b shows the ratio T_c to the critical temperature $T_{c,f}^0$ in free space without disorder. The dimensionless coupling $\lambda = \frac{|f(k_F, k_F)|m}{2\pi}$ characterizes the interaction strength. In the weakly interacting regime $\lambda \ll 1$. The dipole-dipole interaction and the disorder are chosen such that $k_F r_* = 0.1$ and $k_F l = 54$, where r_* and l are the dipole-dipole distance and the mean free path in free space.

As shown in Figs. 1.a and 1.b in the presence of weak disorder the critical temperatures T_c becomes larger than the critical temperature in the absence of disorder. The increase becomes significantly more pronounced when the effective mass (depth of the lattice potential) increases. Using both lattice and disorder one can increase the critical temperature by an order of magnitude for realistic parameters of the system ($\lambda \sim 0.2$).

This work was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 20-42-05002. For more details see [6].



а *б*

Fig. 1. The ratio of the superfluid transition temperature in the lattice in the presence of weak disorder T_c to the temperature in the absence of disorder T_c^0 versus λ (*a*). The ratio of T_c to the temperature in the absence of disorder and optical lattice $T_{c,f}^0$ versus λ (*b*).

References

1. *Anderson P. W.* Theory of dirty superconductors // J. Phys. Chem. Solids. 1959. V. 11. P. 26–30.
2. *Abrikosov A., Gor'kov L. P.* On the theory of superconducting alloys. I. The electrodynamics of alloys at absolute zero // J. Exptl. Theoret. Phys. 1958. V. 35. [Sov. Phys. JETP. 1959. V. 8].
3. *Matveenko S. I.* [et al.]. Superfluid transition in disordered dipolar Fermi gases // Phys. Rev. A. 2020. V. 102(5): 053319.
4. *Pinchenkova V. Y.* [et al.]. Superfluid transition in quasi-two-dimensional disordered dipolar Fermi // Comptes Rendus. Physique. 2023. V. 24(S3). P. 1–11.
5. *Fedorov A. K.* [et al.]. Novel p-wave superfluids of fermionic polar molecules // Scientific reports. 2016. V. 6(1): 27448.
6. *Pinchenkova V. Y., Matveenko S. I., Shlyapnikov G. V.* Superfluid transition of disordered dipolar Fermi gases in a 2D lattice // arXiv preprint. [2024]. arXiv: 2402.06977v1.

Секция прикладной геофизики

Председатель: С. А. Тихоцкий (д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН)

Зам. председателя: Н. В. Дубиня (к. ф.-м. н.)

Секретарь: В. А. Начев

Дата: 04.04.2024 Время: 10:00

УДК 550.8.053

Аппроксимация региональных аномалий силы тяжести системой точечных масс

***А. С. Долгаль*[1], *Н. В. Рыжов*[2, 3]**

[1]Горный институт УрО РАН
[2]Пермский государственный национальный исследовательский университет
[3]Пермский филиал ООО «Противокарстовая и береговая защита»

Введение. Метод истокоообразной аппроксимации применяется при обработке и интерпретации геопотенциальных полей [1] и построение аналитических моделей рельефа земной поверхности. Суть метода — приближение (аппроксимация) наблюденных дискретных значений физического поля U, обусловленного совокупностью реальных геологических объектов с неизвестными параметрами, модельным полем U^* элементарных источников, расположенных в нижнем полупространстве: $\|U - U^*\| \leq \varepsilon$, где ε - малая величина, сопоставимая с точностью измерений поля U. Технологически наиболее просто для этого использовать наборы точечных масс $\boldsymbol{\Omega}$ с фиксированными геометрическими параметрами, в этом случае задача сводится к лишь определению физических параметров путем решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ): $\mathbf{Gm} = \mathbf{u}$, где $\mathbf{u}$ — вектор наблюденных значений гравитационного (магнитного) поля, $\mathbf{m}$ — вектор неизвестных значений физических характеристик элементарных источников; $\mathbf{G}$ — матрица коэффициентов, представляющих собой аномальный эффект каждого источника, входящего в $\boldsymbol{\Omega}$, при $x = 1$.

Далее рассмотрим некоторые аспекты моделирования аномалий силы тяжести на сферообразной Земле с использованием точечных масс [2]. По классификации В.Н. Страхова речь пойдет о региональном варианте линейных аналитических аппроксимаций, использующемся для сравнительно больших площадей 10^5–10^6 кв км [3**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. На больших территориях (по оценкам В.Н. Страхова с размерами от ~100 км) многие интерпретационные технологии, базирующиеся на модели "плоской Земли" и использующие прямоугольную систему координат $\sum xyz$, будут работать не вполне корректно. Фактически в данном случае имеются измерения радиальной компоненты гравитационного поля V_R, а в используемой модели используется составляющая V_Z. Оценкой снизу Δ^* влияния сферичности Земли в этом случае является различие элементов гравитационного поля V_R и V_Z для одних и тех же источников.

Выбор модели Земли. Истинная фигура Земли является геоидом, который при картографических построениях аппроксимируется эллипсоидом вращения. Геодезические координаты (широта B, долгота L) относятся к общеземному эллипсоиду (для России - ПЗ-90.11), размеры и форма которого определяются значениями большой полуоси и сжатия [4]. Напомним, что геодезическая широта B точки — это угол между нормалью к поверхности земного эллипсоида в этой точке и плоскостью геодезического экватора. Геодезическая долгота L точки — это двугранный угол между геодезическим меридианом точки и Гринвичским меридианом (рис. 1).

Экспериментально установлено, что степень отличия «эллипсоидальной» и «сферической» моделей Земли при выполнении трансформаций гравитационного поля не превышает 0.05% [5]. Таким образом, при региональных исследованиях можно ограничиться представлениями о шароообразной форме Земли. При этом для точек задания поля долгота L остается неизменной, но происходит замена

геодезической широты B на геоцентрическую широту φ (рис. 1). Для перехода от геодезической широты к геоцентрической целесообразно использовать формулу Каврайского: $\varphi = B - 8'39'' \sin 2B$ [6].

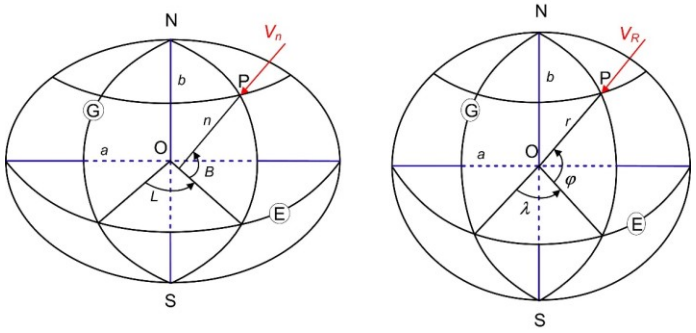


Рис. 1. «Эллипсоидальная» и «сферическая» модели Земли: N, S — полюса; G — плоскость Гринвичского меридиана; E — плоскость экватора; B — геодезическая широта; φ — геоцентрическая широта; L, λ — долгота. Красный цвет — вектор силы тяжести

Аппроксимационная конструкция. Элементами матрицы коэффициентов $\mathbf{G} = \{g_{ij}\}$ для «сферической Земли» являются значения радиальной производной гравитационного потенциала точечного источника V_R, определенные в сферической системе координат. Точечные массы располагаются под точками измерений на одинаковых относительных глубинах R^* под точками задания поля (рис. 2).

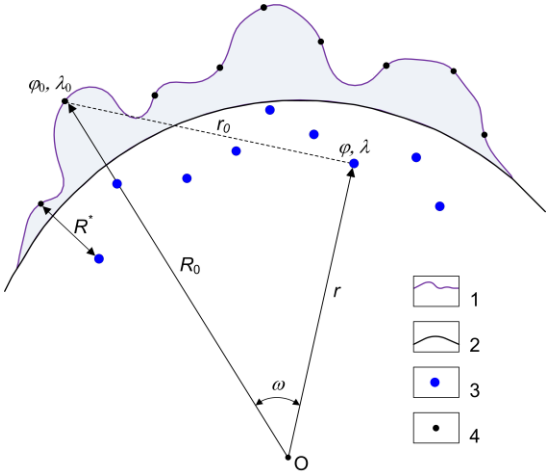


Рис. 2. Схема расположения эквивалентных источников при аппроксимации аномалий силы тяжести с использованием сферических координат: *1* — промежуточный слой горных пород, использующийся при вычислении аномалий Буге; *2* — поверхность сферической модели Земли; *3* — точечные массы; *4* — точки задания значений гравитационного поля

При известных пространственных координатах φ, λ, r и массах m эквивалентных источников можно осуществлять вычисление производной любого порядка. Это позволяет преобразовать исходное поле U в соответствующую трансформанту, для произвольно выбранных точек внешнего, по отношению к источникам, пространства.

Определение значений точечных масс. Достаточно быстрое и точное решение СЛАУ обеспечивает при геометрии аппроксимационной конструкции, отвечающей сравнительно небольшим числам обусловленности матрицы $\mathbf{G}$: $\nu_G = \|\mathbf{G}\|\|\mathbf{G}^{-1}\| \leq 1000$ [7]. Скорость вычислений можно повысить за счет оптимизации расчета коэффициентов g_{ij} и учета специфических особенностей матрицы $\mathbf{G}$. Для гридированных данных $\{u_{kl}\}, k = \overline{1,m}, l = \overline{1,n}$ вычисление угла при центре Земли между точкой измерений поля и точечной массой: $cos\omega = cos\varphi_0 cos\varphi + sin\varphi_0 sin\varphi \cos(\lambda_0 - \lambda)$ можно существенно ускорить. Для этого в программе достаточно однократно рассчитать m значений $cos\varphi$ и n значений $\cos(\lambda_0 - \lambda)$, а затем сохранить их в одномерных массивах вещественных чисел.

Для матрицы $\mathbf{G}$ характерно наличие весьма малых значений коэффициентов g_{ij}, отвечающих значительным расстояниям между источниками и точками расчета поля. Обозначим V_R^{max} амплитуду поля непосредственно над аппроксимирующей точечной массой с глубиной h. Амплитуда гравитационного поля при удалении от массы на расстояние $10h$ составляет ~$0.001V_R^{max}$, $20h$ — ~$0.0001V_R^{max}$, $50h$ —

~0.000008V_R^{max}. Часть коэффициентов $g_{ij} \cong 0$ можно не учитывать при решении СЛАУ, т.е. считать матрицу $\mathbf{G}$ разреженной. Можно выбрать пороговое значение r_{max} для расстояния r_0 «точка расчета — источник поля», предполагая, что при $r_0 > r_{max}$ выполняется условие $g_{ij} = 0$. Если вектор $\mathbf{u}$ содержит N компонент, а внутри окружности радиусом r_{max} находится k точек поля, то разреженная матрица коэффициентов $\widetilde{\mathbf{G}}$ включает в себя лишь $N \times k$ элементов.

Предлагается применение алгоритма последовательного уточнения приближений к искомым значениям масс $\mathbf{m}$ путем серии $\mu = \overline{1,P}$ решений системы (декомпозиция задачи): $\widetilde{\mathbf{G}}\mathbf{m} = \mathbf{u}$. Решение этой СЛАУ $\mathbf{m}^1$, полученное путем выполнения Q итераций, можно рассматривать как первое приближение к решению исходной СЛАУ. Разность $\mathbf{m}$ — $\mathbf{m}^1$ будет удовлетворять системе уравнений $\mathbf{G}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^1) = \mathbf{u} - \mathbf{G}\mathbf{m}^1$, вместо которой будем решать систему $\widetilde{\mathbf{G}}\mathbf{r} = \mathbf{u} - \mathbf{G}\mathbf{m}^1$. Таким образом $\mathbf{m}^2 = \mathbf{m}^1 + \mathbf{r}$. Каждое последующее приближение μ+1 будет находиться следующим образом: $\mathbf{m}^{\mu+1} = \mathbf{m}^{\mu} + \widetilde{\mathbf{G}}^{-1}(\mathbf{u} - \mathbf{G}\mathbf{m}^{\mu}) = (\mathbf{E} - \widetilde{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{G})\mathbf{m}^{\mu} + \widetilde{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{u}$. Матрицы $\mathbf{G}$ и $\widetilde{\mathbf{G}}$ достаточно близки, поэтому матрица $\mathbf{E} - \widetilde{\mathbf{G}}^{-1}\mathbf{G}$ имеет малую норму и представленный итерационный процесс обладает хорошей сходимостью [8].

В качестве примера работы этого алгоритма возьмем фрагмент глобальной модели гравитационного поля в полной редукции Буге для территории, ограниченной 52°–72° с.ш., 84°–132° в.д. Территория ~ 5.15 млн. кв км охватывает всю Сибирскую платформу и структуры ее обрамления. Время решения задачи составило 15 мин 55 с, показатели качества решения *F2* = 0.135 мГал и *FM* = 2.67 мГал. Вычисления проводились на ноутбуке Asus Aspire VN7–791 с процессором Intel(R) Core(TM) i7-4710HQ CPU с тактовой частотой 2.50GHz. На рис. 4 представлены две карты трансформант гравитационного поля, при создании которых применялся способ двойного проектирования, когда эллипсоид проектируется на шар (сферу Каврайского), а после этого шар отображается в нормальной конической проекции (НКП) на плоскости [4].

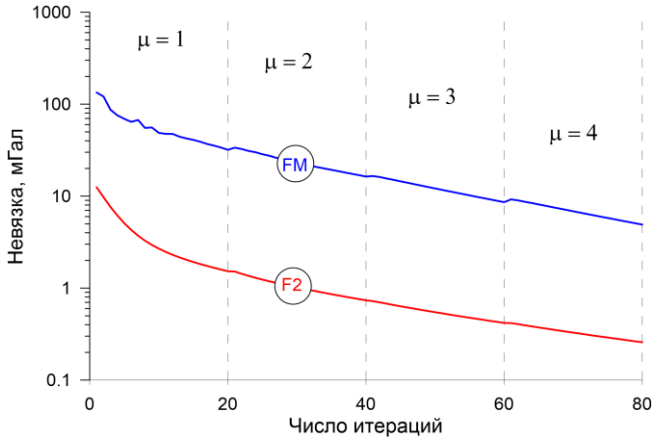


Рис. 3. Графики итерационного процесса решения СЛАУ

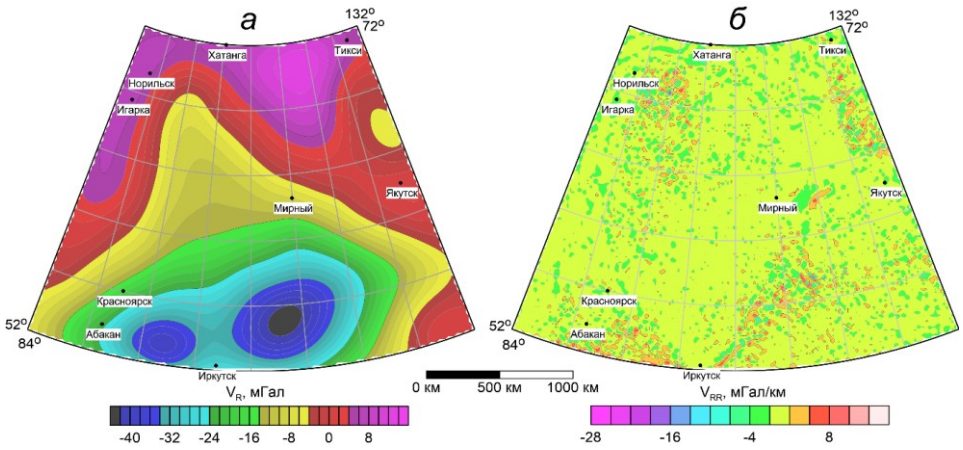


Рис. 4. Карты изоаномал силы тяжести V_R в редукции Буге на высоте 250 км (*а*) и изолиний 2-й радиальной производной гравитационного потенциала V_{RR} на высоте 20 км (*б*)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23–27–00113, https://rscf.ru/project/23-27-00113.

Литература

1. *Долгаль А. С., Пугин А. В., Новикова П. Н.* История метода истокообразных аппроксимаций геопотенциальных полей // Физика Земли. 2022. Т. 2. № 2. С. 3–26.
2. *Долгаль А. С.* [и др.]. Аппроксимация аномалий силы тяжести при региональных исследованиях с учетом шарообразной формы Земли // Геофизика. 2021. № 5. С. 36–43.
3. *Страхов В. Н., Керимов И. А., Степанова И. Э.* Разработка теории и компьютерной технологии построения линейных аналитических аппроксимаций гравитационных и магнитных полей. — М.: ОИФЗ РАН. 2009.
4. *Серапинас Б. Б.* Геодезические основы карт. — М.: Изд-во Моск. ун-та. 2001.
5. *Долгаль А. С.* [и др.]. Выбор модели Земли для трансформации аномалий силы тяжести в процессе региональных исследований // Геофизика. 2022. № 5. С. 6–12.
6. *Белкин А. М.* [и др.]. Воздушная навигация: справочник. — М.: Транспорт, 1988.
7. *Долгаль А. С., Новикова П. Н.* Вычислительные аспекты моделирования аномалий силы тяжести системой точечных масс // Вестник Воронежского государственного университета. Сер.: Геология. 2023. № 2. С. 82–93.
8. *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы. — М.: Наука. 2000.

УДК 544.6.076.2

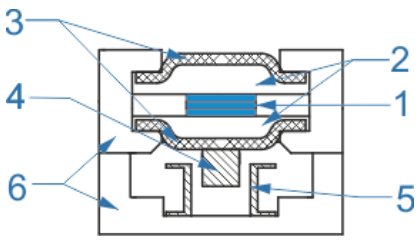
Определение требований к устройству для локального подогрева и поддержания стабильной температуры в четырехэлектродном МЭП

***А. В. Акинина*[1,2], *И. В. Егоров*[1,2], *А. С. Бугаев*[1,2]**

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ООО «Р-сенсорс»

Существуют определенные требования к приборам, которые используются в сейсмологии, мониторинге сейсмической активности или поиске полезных ископаемых. Это надежность, точность и эффективность измерений. В последние годы сейсмические датчики, действующие на основе молекулярно-электронной технологии, доказали свою производительность. С практической точки зрения, наиболее важным является их способность обеспечивать измерения с уровнем чувствительности, в десять раз превосходящим электродинамические сейсмоприемники, включая измерения в области низких частот ≤ 1 Гц [1, 2]. Однако при изменении температуры коэффициент преобразования первичного чувствительного элемента значительно снижается. В данной работе рассмотрена возможность создания новой конфигурации прибора с системой подогрева внутри конструкции датчика и определены требования к устройству для локального подогрева и поддержания стабильной температуры.

Исследуемый образец представляет собой стандартную четырехэлектродную систему, состоящую из двух катодов и двух анодов. По краям от электрохимической ячейки симметрично была расположена система локального подогрева, которая представляет собой 2 резистора номиналом 65 Ом.



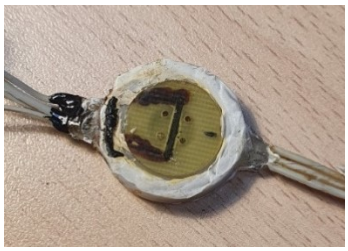




Рис. 1. Строение четырехэлектродной электрохимической ячейки: *1* — электрохимическая ячейка, заключенная в керамический корпус с дополнительными резисторами, *2* — раствор электролита, *3* — мембрана, *4* — постоянный магнит, *5* — катушка индуктивности, *6* — фланцы внешнего корпуса

Рис. 2. Образец электрохимического элемента с устройством локального подогрева

Рис. 3. Собранный электрохимический сейсмометр с данным элементом

Изготовленные образцы электрохимических элементов с устройством локального подогрева были собраны в герметичный корпус, как показано на рис. 1–3. Далее они были заполнены восоконцентрированным 4 моль/л электролитом на основе LiI с добавлением I_2 0,4 моль/л. Заполнение происходило в вакуумной камере под давлением 0,1 атм для избежания попадания пузыря воздуха в рабочий объем электрохимического сейсмометра, который в следствии изменения внешних параметров (давление, температура) вызывает перетекание электролита через чувствительный элемент создавая ложный сейсмический сигнал.

Образцы были подключены к специально разработанной схеме, включающей в себя стандартную схему подключения электрохимического сейсмометра, сопряженную с гальванически развязанной схемой управляющей рассеиваемой мощностью на устройстве локального подогрева.

Были получены значения фоновых токов с обоих катодов электрохимического чувствительного элемента и значения АЧХ на частоте 1 Гц в зависимости от рассеиваемой мощности, представленные на рис. 4.

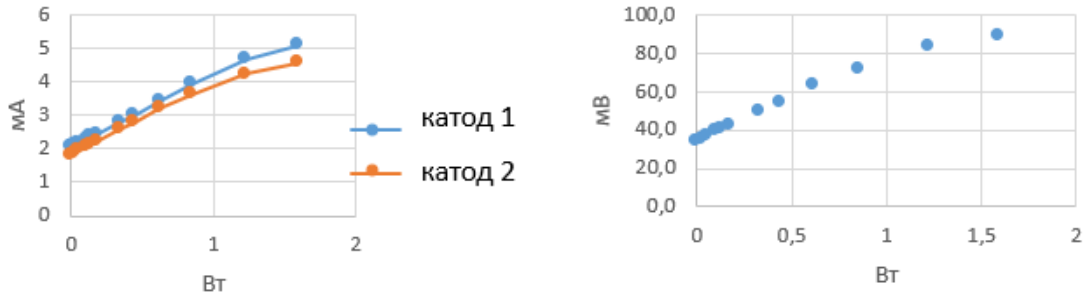


Рис. 4. Зависимость катодных токов (*а*) и значения АЧХ на частоте 1 Гц при одинаковой амплитуде входного воздействия (*б*) от рассеиваемой мощности устройства локального подогрева

Получены АЧХ в частотном диапазоне от 0,005 до 500 Гц при нулевой рассеиваемой мощности и 0,58 Вт, которые показаны на рис. 5*а*. Были также записаны и оцифрованы сейсмические сигналы длинного промежутка времени для оценки уровня собственных шумов электрохимических чувствительных элементов, содержащих устройство локального подогрева при нулевой рассеиваемой мощности и 0,052 Вт. Эти данные приведены на рис. 5*б*.

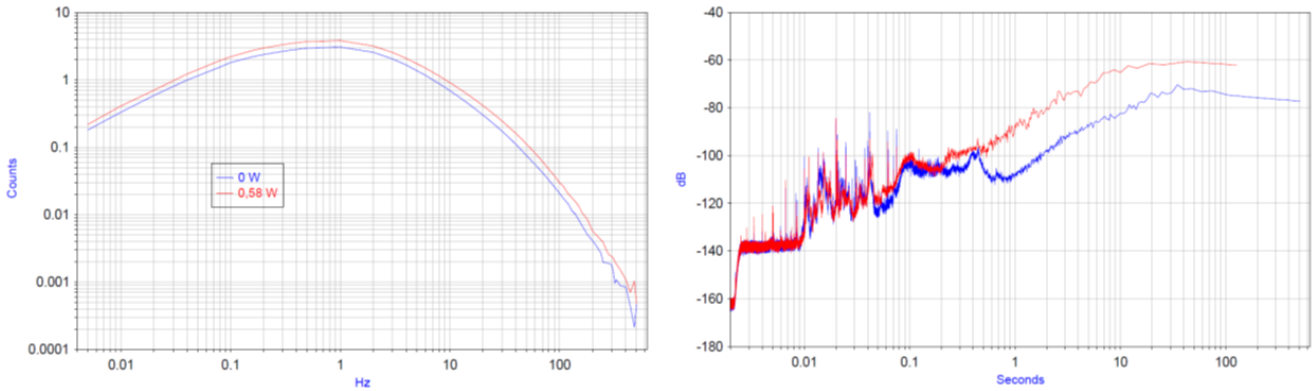


Рис. 5. АЧХ электрохимического чувствительного элемента (*а*) при нулевой рассеиваемой мощности (синий график) и 0,58 Вт (красный график). Спектральные данные длительных сейсмических записей электрохимического элемента (*б*) при нулевой рассеиваемой мощности (синий график) и 0,052 Вт (красный график)

Повышенное значение на низких, менее 1 Гц, сигнала на графике спектральных данных для электрохимического чувствительного элемента с рассеиваемой мощностью 0,052 Вт по сравнению с данными с нулевой рассеваемой мощностью связан с конвективными процессами происходящих в электродной структуре с неравномерным распределением температуры.

Полученные данные согласуются с теоретическими исследованиями, что позволяет использовать устройство локального подогрева в электрохимических чувствительных элементах для стабилизации температуры.

Литература

1. *Huang H., Agafonov V.,. Yu H.* Molecular electric transducers as motion sensors: a review // Sensors (Basel). 2013. V. 13(4). P. 4581–4597.

2. *Qi W.* [et al.]. MEMS Based Triaxial Electrochemical Seismometer, 15th IEEE International Conference on Nano // Micro Engineered and Molecular System. 2020. P. 59–62.

УДК 536.51.083.6, 523.31-335.7

Система прецизионного мониторинга температуры горных массивов

В. В. Гравиров, Д. В. Лиходеев

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН

В ИФЗ РАН разработана многоканальная прецизионная система мониторинга температуры горных массивов, способная регистрировать изменения температуры с относительной точностью порядка 0,005 град. С [1]. В данный момент система постоянно продолжает модернизироваться, как с целью улучшения разрешающей способности, уменьшения шумовых составляющих сигналов температуры, так и увеличения числа каналов наблюдения [2]. Разработанная система входит в состав комплексной установки мониторинга геофизических параметров Северокавказской геофизической обсерватории ИФЗ РАН, расположенной в штольне Баксанской нейтринной обсерватории. Производится одновременная регистрация температуры воздуха в штольне и температуры окружающего горного массива (на глубине порядка 5 м от стен штольни), наклонов, влажности, атмосферного давления, а также мониторинг плотности аэрозолей внутри штольни [3, 4].

Знание количественной информации о тепловом потоке из недр Земли имеет основополагающее значение для более глубокого понимания взаимосвязи между флюидно-магматическими и геодинамическими процессами. Однако сегодня для прямых измерений глубинных температур доступны только первые километры земной коры. При этом прецизионные измерения температур зачастую затруднены ввиду присутствия повышенного уровня помех, связанных с значительными перепадами температуры воздушных масс в точках наблюдения, а также наличием ветровых импульсов. Таким образом, для прецизионной регистрации температуры необходимо обеспечить максимально стабильные условия в точке их измерения. Одним из наиболее подходящих мест для подобных наблюдений является штольня Баксанской нейтринной обсерватории. Ее расположение в непосредственной близости от магматического очага вулкана Эльбрус позволяет получить уникальные данные о структуре и динамике теплового поля в его окрестностях. Изучение этого вулкана является особенно важной задачей, как с точки зрения получения новых фундаментальных знаний о строении магматических структур, так и с точки зрения оценки вулканической опасности, обусловленной наличием жидкого магматического расплава в недрах вулкана, что, в свою очередь, позволит получить новые данные о потенциальной опасности Эльбрусского вулканического центра. Дальнейшая оценка вклада кондуктивной и конвективной составляющих в тепловой поток позволит сделать выводы о динамике флюидо-магматической системы Эльбрусского вулканического центра и изучить режим ее функционирования, а также может быть использована непосредственно для мониторинга вулканической опасности.

Литература

1. *Лиходеев Д. В., Гравиров В. В., Кислов К. В.* Прецизионные дифференциальные термометры для исследования тепловых процессов на базе Северокавказской геофизической обсерватории // Наука и технологические разработки. 2018. Т. 97. № 1. С. 15–25. DOI: 10.21455/std2018.1-2
2. *Гравиров В. В.* [и др.] Развитие систем прецизионных наклономерных наблюдений в условиях подземной обсерватории // Сейсмические приборы. 2022. Т. 58. № 1. С. 29–52. DOI: 10.21455/si2022.1-2
3. *Лиходеев Д. В., Собисевич А. Л., Гравиров В. В.* Приливные эффекты в тонкой структуре тепловых полей по результатам наблюдений в глубокой штольне Северокавказской геофизической обсерватории // Доклады Российской академии наук. Науки о Земле. 2022. Т. 503. № 2. С. 72–77. DOI: 10.31857/S2686739722040090
4. *Pershin S. M.* [et al.] Volcanic activity monitoring by unique lidar based on a diode laser // Laser Phys. Lett. 2020. V. 17(11). P. 115607–115613. DOI: 10.1088/1612-202x/abbedc

УДК 550.8

Влияние развития трещин в керогене в процессе его созревания на физические свойства флюида пород доманиковой формации

В. С. Окуневич, И. О. Баюк

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН

Малопроницаемые и малопористые породы доманиковой формации являются нефтематеринскими породами [1]. Созревание жидкого углеводорода происходит из твердого органического вещества — керогена. Данная работа посвящена исследованию созревания керогена в доманиковых отложениях.

В данной работе было проведено моделирование распространение трещины на примере пород доманиковой формации, а также была проведена оценка чувствительности полученных моделей к таким параметрам, как например, температура, упругие свойства компонент, тип керогена и т.д. Также были оценены изменение значений физических параметров флюида в результате развития трещин таких как плотность и скорость распространения упругой продольной волны.

Степень созревания керогена важное понятие, которое учитывается в данном исследовании. Превращение керогена в нефть должно вести к увеличению порового давления. Как следствие, должны возникать трещины. Основой для данного исследования служит работа, посвященная распространению докритических трещин в нефтенасыщенных монетообразных пустотах в результате преобразования кероген-нефть [3].

Было проведено моделирование докритического развития трещин в породах доманиковой формации, которая характеризуется наличием твердого органического вещества — керогена. Моделирование проводилось с учетом двух типов керогена II и III, так как именно они характерны для Волго-Уральского региона [1].

В ходе моделирования варьировался параметр температуры и строились параметрические графики при температуре 80, 90, 100, 130 °C. Температура 80 °C соответствует доманиковым отложениям в Бузулукской впадине. Глубина залегания высокоуглеродистой формации составляет примерно 3000 м [2]. Данное исследование является частью больших работ, которые будут исследовать как раз породы из региона Бузулукской впадины.

На рис. 1 представлены параметрические графики роста размеров докритической трещины в керогене. Параметром является температура. В данном исследовании считается, что породы, в которых происходит созревание керогена сформированы и находятся на фиксированной глубине и температура, соответственно, постоянна. Из графиков видно, что радиус трещины может увеличиваться по сравнению с изначальным радиусом керогеновой частицы больше чем в 9 раз. Помимо размеров были также рассчитаны значения избыточного порового давления, образующегося в результате созревания керогена. После моделирования роста трещины были рассчитаны плотность флюида, скорость распространения упругой продольной волны в флюиде (рис. 2).

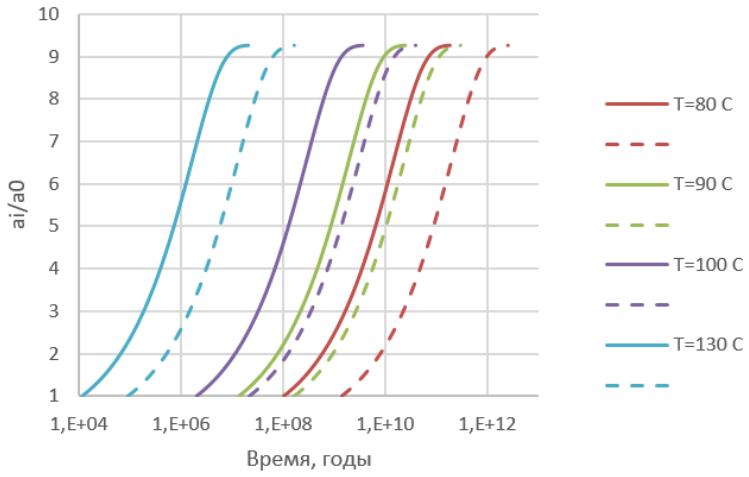


Рис. 1. Зависимость линейных размеров трещины от времени начала ее формирования в керогене, для различных значений температуры кероген-содержащей формации. Сплошные кривые — нефть образовалась из керогена II типа; штриховые — из керогена III типа

Также было рассчитано на сколько процентов изменяться значения физических свойств флюида, когда трещины перестанут быть изолированными, то есть избыточное давление станет равным нулю (табл. 1).

Таблица 1

Температура,°С	80		90		100		130	
Тип керогена	II	III	II	III	II	III	II	III
ρ	5,2 %	0,1%	6,2%	1,0%	7,1%	1,9%	4,7%	4,73%
Vp	0,5%	0,64%	2,9%	3,1%	5,4%	5,5%	13,1%	13,1%
K	6,2%	1,3%	11,6	7,1%	16,8%	12,5%	28%	28%

Скорость распространения продольной упругой волны в нефти, по мере роста трещины, падает (рис. 2). Однако падение составляет около 0,5 %.

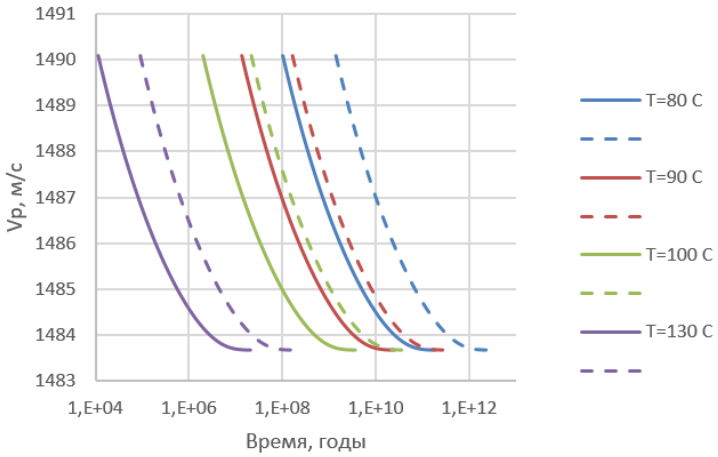


Рис. 2. Зависимость избыточного давления в трещине от времени начала ее формирования в керогене для различных значений температуры кероген-содержащей формации. Сплошные кривые — нефть образовалась из керогена II типа; штриховые — из керогена III типа

Литература

1. *Ступакова А. В.* [и др.]. Доманиковые отложения Волго-Уральского бассейна — типы разреза, условия формирования и перспективы нефтегазоносности // Георесурсы. 2017. Спецвыпуск. Ч. 1. С. 112–124. DOI: 10.18599/grs.19.12.
2. *Христофорова Н. Н.* [и др.]. Тепловой режим и оценка перспектив нефтегазоносности Приволжского региона // Георесурсы. 2004. № 1(15). С. 24–27.
3. *Fan, Z.Q., Jin, Z.-H. & Johnson, S.E.* Subcritical propagation of an oil-filled penny-shaped crack during kerogen–oil conversion // Geophys. J.Int. 2010. V. 182(3). P. 1141–1147. DOI: doi:10.1111/j.1365-246x.2010.04689.x.

УДК 004.932.2, 550.8.052

О возможности применения методов компьютерного зрения при обработке результатов расширенного комплекса геофизических исследований скважин

***Д. Ю. Куприн*[1], *Н. В. Дубиня*[1,2]**

[1]Институт физики Земли имени О. Ю. Шмидта РАН
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Геофизические исследования скважин являются важным источником информации о свойствах и строении горных пород, слагающих верхние слои Земной коры. На сложных для разработки месторождениях применяется расширенный комплекс геофизических исследований, включающий в себя, помимо прочих исследований, определение свойств пород околоскважинной зоны в различных азимутальных направлениях. Наиболее часто используются электрические и акустические азимутальные развертки, которые отображают, соответственно, удельное электрическое сопротивление и скорость прохождения

упругих волн через породы околоскважинной зоны. Интерпретация азимутальных разверток позволяет получить важную информацию о строении горных пород околоскважинного пространства, в особенности, позволяет выделить и характеризовать отдельные структурные элементы околоскважинного пространства, например такие как естественные трещины.

Интерпретация азимутальных разверток является отдельной, достаточно сложной дисциплиной. В ходе ручной интерпретации существует риск ошибки, невыделения, или некорректного выделения отдельных структурных элементов, а также погрешности в определении свойств структурных элементов. Ключевой же проблемой ручной интерпретации является трудоемкость и длительность данного процесса. В рамках данного исследования предлагается решение указанной проблемы интерпретации азимутальных разверток. Решением является применение автоматизированного алгоритма интерпретации, использующего методы компьютерного зрения и машинного обучения для выделения определенных структурных элементов, а также определения их характеристик на азимутальных развертках.

Обработка азимутальных разверток алгоритмами компьютерного зрения невозможна без их предварительной предобработки, так как образовавшиеся при проведении исследований шумы и артефакты записи могут существенно повлиять на результат работы алгоритмов компьютерного зрения [2]. Применяемые в данном исследовании алгоритмы компьютерного зрения можно разделить на две группы: алгоритмы, основанные на бинаризации изображения [3], а также алгоритмы, основанные на выявлении границ элементов на изображениях посредством обработки градиентов яркости изображения [1, 4, 5].

Результаты работы алгоритмов компьютерного зрения далее используются для аппроксимации кривой, описывающей вероятную трещину вскрытую скважинной. Достоверность работы алгоритма автоматической интерпретации азимутальных разверток достигается путем применения методов компьютерного зрения в виде ансамбля методов, что позволяет проводить кросс-корреляцию и оценку достоверности результатов их применения. Самым достоверным набором кривых считается такой, в котором большее количество методов укладывается в допустимый интервал корреляции.

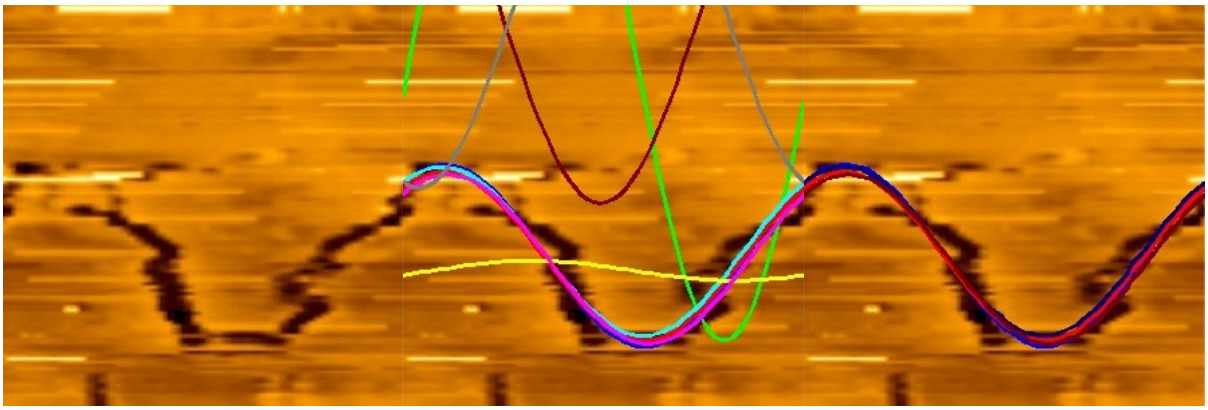


Рис. 1. Исходное изображение, результаты работы ансамбля методов компьютерного зрения, итоговый результат работы ансамбля после отбраковки некорректных методов

В ходе обработки азимутальной развертки ансамблем методов компьютерного зрения в скользящем окне, каждая из вероятных трещин выделяется по несколько десятков раз, и, соответственно, получается несколько десятков достоверных наборов кривых, создающих выборку успешных выделений трещины, к которой возможно применить методы статистического анализа. Математическим ожиданием такой выборки является вероятное расположение искомой трещины, а дисперсия укажет на вероятную погрешность в корректности определения расположения трещины, исходя из результатов работы алгоритма.

Литература

1. *Canny J.* A Computational Approach to Edge Detection // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. Nov. 1986. V. PAMI-8(6). P. 679–698. DOI: 10.1109/TPAMI.1986.4767851.
2. *Getreuer P.* A Survey of Gaussian Convolution Algorithms // Image Processing On Line. 2013. V. 3. P. 286–310. DOI: 10.5201/ipol.2013.87.
3. *Otsu N.* A threshold selection method from gray-level histograms // IEEE Trans. Sys. Man. Cybern. Syst. 1979. V. 9. P. 62–66.
4. *Scharr H.* Optimal Operators in Digital Image Processing : Diss. … Doktorwurde der Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultat. Heidelberg, 2000.
5. *Sobel I., Feldman G.* An Isotropic 3x3 Image Gradient Operator. [Presented at the Stanford Artificial Intelligence Project (SAIL) in 1968]. DOI: 10.13140/RG.2.1.1912.4965.

УДК 550.344.56

Поле поверхностной волны типа Рэлея в слоистых плавно неоднородных средах

Д. А. Жарков, Р. А. Жостков

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН

Рассмотрено распространение поверхностной волны рэлеевского типа вдоль свободной границы двух слоистых сред, связанных между собой плавным изменением параметров. Данная постановка является полезной для задачи теоретического обоснования метода микросейсмического зондирования (ММЗ), которой посвящена, например, работа [1], однако данный вопрос все еще нуждается в дальнейшем исследовании. Кроме того, решение этой задачи позволит реализовать алгоритм инверсии ММЗ и объединить его с другими методами [2].

Поле в упругой среде описывается уравнениями механики сплошной среды, записанными для смещений [3]. Смещение $\vec{u}$ элемента упругой среды выражается через скалярный φ и векторный $\vec{\psi}$ потенциалы и в двумерной постановке имеют вид:

$$\vec{u} = \nabla\varphi + \mathrm{rot}\vec{\psi}, u_x = \frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial\psi}{\partial z}, u_z = \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial x} \quad (1)$$

Потенциалы удовлетворяют волновым уравнениям, а для монохроматических волн — уравнениям Гельмгольца:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi + k_l^2\varphi = 0, \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi + k_t^2\psi = 0 \quad (2)$$

В уравнениях (2) введены волновые числа $k_l = \omega/c_l$ — для продольных волн и $k_t = \omega/c_t$ — для поперечных волн. Решения данных уравнений в полупространстве отыскиваются в виде плоских волн, бегущих вдоль оси *x* и убывающих по оси *z*:

$$\varphi = Ae^{-qz}e^{-i(\omega t - kx)}, \psi = Be^{-sz}e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (3)$$

где величины $q = \sqrt{k^2 - k_l^2}$, $s = \sqrt{k^2 - k_t^2}$ определяют характерные масштабы затухания поля с глубиной.

Для слоев решения представляются в следующем виде:

$$\varphi_i = A_i^{(-)}e^{-q_i z}e^{-i(\omega t - kx)} + A_i^{(+)}e^{q_i z}e^{-i(\omega t - kx)}, \psi_i = B_i^{(-)}e^{-s_i z}e^{-i(\omega t - kx)} + B_i^{(+)}e^{s_i z}e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (4)$$

где $q_i = \sqrt{k^2 - k_{li}^2}$, $s_i = \sqrt{k^2 - k_{ti}^2}$, *i* — номер слоя.

Характеристики поверхностной волны определяются не только уравнениями (1)-(4), но и граничными условиями. Они представляют собой систему уравнений, которую можно представить в матричном виде. Анализ этой матрицы в свою очередь позволяет определить скорость волны, а также связь между амплитудами потенциалов.

Для описания плавного перехода в качестве инварианта была использована величина потока энергии через полубесконечное сечение, которая выражается следующим образом [1]:

$$P = \omega^2 c_g(\omega)\int_0^\infty \rho(z)[u_x^2 + u_z^2]dz = \omega^2 c_g(\omega)\sum_{i=1}^N \int_0^{h_i} \rho_i\left[u_{ix}^2 + u_{iz}^2\right]dz = C(\omega, c_l, c_t, \rho)F^2, \quad (5)$$

где c_g — групповая скорость, *F* — нормировочная амплитуда.

При подстановке выражений для компонент смещений, поток будет пропорционален квадрату единственной выбранной нормировочной амплитуды с коэффициентом, зависящем от частоты и упругих постоянных. Приравнивая поток энергии для первой и второй среды, можно получить выражение для относительного изменения амплитуды:

$$\frac{F_2}{F_1} = \sqrt{\frac{C_1(\omega, c_l, c_t, \rho)}{C_2(\omega, c_l, c_t, \rho)}} \quad (7)$$

На рис. 1 представлены зависимости изменения амплитуды при синхронном изменении скорости продольных и поперечных волн в первом и втором слое при переходе волны из однослойной системы в двухслойную. При увеличении скоростей в верхнем слое амплитуда уменьшается, а при изменении скорости в нижнем слое увеличивается, что согласуется с ММЗ, согласно которому при переходе волны в более «мягкую» среду амплитуда увеличивается, а в более «твердую» — уменьшается.

Отметим, что разница теории и численного моделирования составляет менее 1%, однако при замене области перехода на более узкую (что более характерно для реальных ситуаций), наблюдается большее расхождение с теорией, связанное с тем, что в этом случае часть энергии отражается от границы и условие сохранения потока энергии не выполняется. Однако оценки показывают, что для рассматриваемых случаев это расхождение оказывается около 5%, поэтому можно считать, что при небольших контрастах результаты расчетов для плавного перехода можно применять и для резкого.

Таким образом, в работе предложен подход, позволяющий описывать изменение амплитуды поверхностной волны при переходе из одной слоистой системы в другую. Полученные результаты могут быть использованы для задачи инверсии ММЗ, поскольку позволяют теоретически вычислять изменение амплитуды ПАВ при изменении характеристик среды.

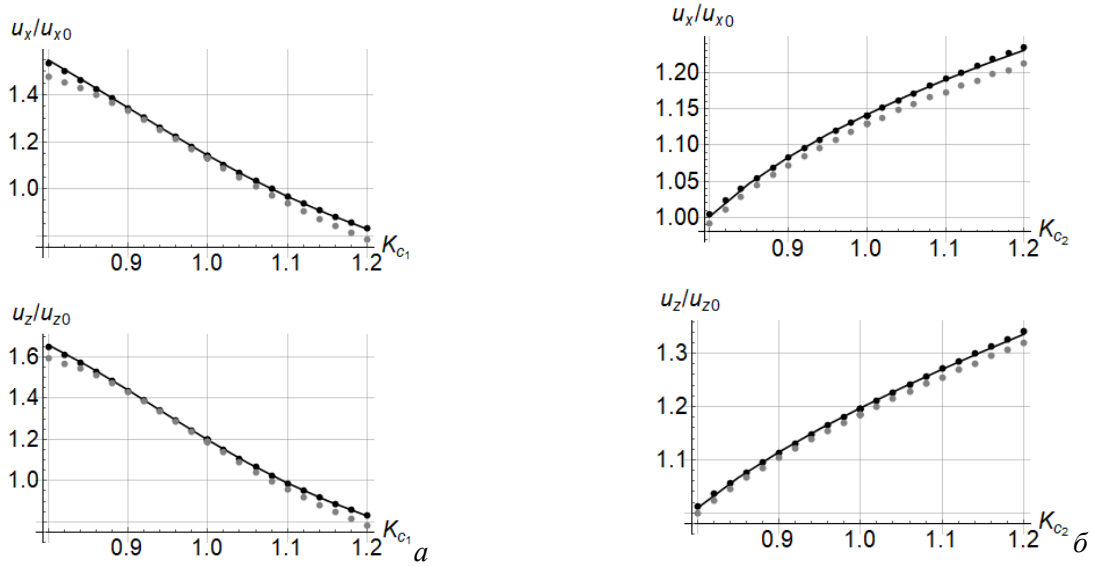


Рис. 1. Зависимость относительного изменения амплитуды горизонтальной и вертикальной компонент смещений на поверхности от коэффициента совместного изменения скорости продольных и поперечных волн в верхнем (а) и нижнем (б) слое; λ/H=2.5; сплошная линия — теория, черные точки — численное моделирование (зона перехода — 50λ), серые точки - численное моделирование (зона перехода — λ)

Таблица 1. Параметры опорной и исследуемой среды

Модель	Номер слоя	Скорость продольных волн, c_l, м/с	Скорость поперечных волн, c_t, м/с	Плотность, ρ, кг/м^3	Мощность, км
Опорная	1	6181	3467	2714	∞
Исследуемая	1	$6181K_{c_1}$	$3467K_{c_1}$	2714	24.5
	2	$8047K_{c_2}$	$4530K_{c_2}$	3333	∞

Литература

1. *Яновская Т. Б.* К теории метода микросейсмического зондирования // Физика Земли. 2017. № 6. С. 18–23.
2. *Жостков Р. А.* [и др.]. Сравнение микросейсмического зондирования и томографического подхода при изучении глубинного строения Земли // Известия РАН. Серия физическая. 2017. Т. 81. № 1. С. 72–75.
3. *Викторов И. А.* Звуковые поверхностные волны в твердых телах. — М.: Наука, 1981.

УДК 539.561

Обзор методов исследований естественной трещиноватости и применение геомеханического моделирования на примере конкретного месторождения в реальных условиях для прогнозирования естественной трещиноватости горных пород в определенном регионе

И. А. Воронов

Институт физики Земли РАН

Трещиноватость является определяющей структурно-механической особенностью породного массива. Трещины наблюдаются в породах любого происхождения и по генетическому признаку подразделяются на естественные и искусственные трещины [1]. Так как все больше залежей углеводородов разрабатываются в зонах с развитой трещиноватостью коллекторов, а изучение их свойств с использованием стандартных методов, как правило, не давало подлинных результатов, было положено начало углубленного исследования трещиноватости с помощью способов геофизических исследований скважин (далее - ГИС) и сейсмических методов. Достаточно долгое время предпринимаются попытки найти способ прямого выделения трещиноватости и оценки пространственной плотности трещиноватости. В основном для решения этих задач активно пытались использовать данные ГИС. Но в связи со сложностями выделения трещин, данная задача до сих пор не решена. В связи с этим решение проблемы стараются обнаружить в комплексировании методов каротажа. Очень важную роль помимо методов ГИС играют сейсмические методы, ведь основным их преимуществом является равномерный охват значительной площади данных на месторождении, не зависящее от расположения скважин на площади, которые как правило располагаются неравномерно.

В данном исследовании в первую очередь будет приведен обзор существующих методов ГИС и сейсмических методов, которые вносят существенный вклад в определении естественной трещиноватости горных пород, а также в комплексе позволяют определить местоположение трещин, их тип и количество, размеры, пространственную ориентацию каждой из них в пласте. Будут рассмотрены физические основы методов, области их применимости, анализ и практический вклад каждого из них и в совокупности для определения напряженно-деформированного состояния и предсказания естественной трещиноватости [2].

Далее предлагается методика комплексирования вышеописанных методов, которые совместно представляют собой геомеханическое моделирование, являющееся на данный момент одним из основных численных методов моделирования напряженно-деформированного состояния массива. В данной работе рассматривается пример использования геомеханического моделирования для прогнозирования естественной трещиноватости массива горных пород на примере одного месторождения в реальных условиях. В качестве входных данных для геомеханического моделирования использовались каротажные данные, лабораторные исследования керна, конструкция, инклинометрия, литология, стратиграфия, имиджеры и другие данные по группе скважин месторождения.

Использование геомеханического моделирования для оценки напряжений и деформаций горных пород становится все более практически эффективным, в связи с тем, что в последнее время в разработку вовлекаются нетрадиционные коллектора углеводородов, в процессе освоения которых необходима более точная оценка напряженного-деформированного состояния горных пород в связи с осложнениями, возникающими в процессе бурения. Совершенствование и реализация данного подхода поможет привести к сокращению затрат на бурение и эксплуатацию скважины, а также к уменьшению рисков аварийных ситуаций на месторождении.

Литература

1. *Иудин М. М.* О трещиноватости массива горных пород // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). 2007. Т. 17. № 2. С. 279-284.
2. *Orekhov A.N.* [et al.]. Possibilities of geophysical methods for predicting reservoir fracrures // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering. 2019. V. 330. 6. 198-209.

УДК: 534-16

Малогабаритный радиоэлектронный цифровой модуль для построения нодальной сейсмической системы, взаимодействующей с БпЛА

И. В. Горчаков [1], ***В. М. Агафонов***[1] ***А. Н. Антонов***[2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]ООО «Р-сенсорс»

Цифровые автономные сейсмические системы (ноды) получили в последние годы существенное распространение. Недостатком таких систем является невозможность контроля качества получаемых данных. Совместное использование нодальной системы с беспилотным летательным аппаратом (БпЛА) позволяет выполнить контроль качества данных, одновременно сохраняются присущие нодальным системам достоинства, такие как гибкость в использовании и надежность.

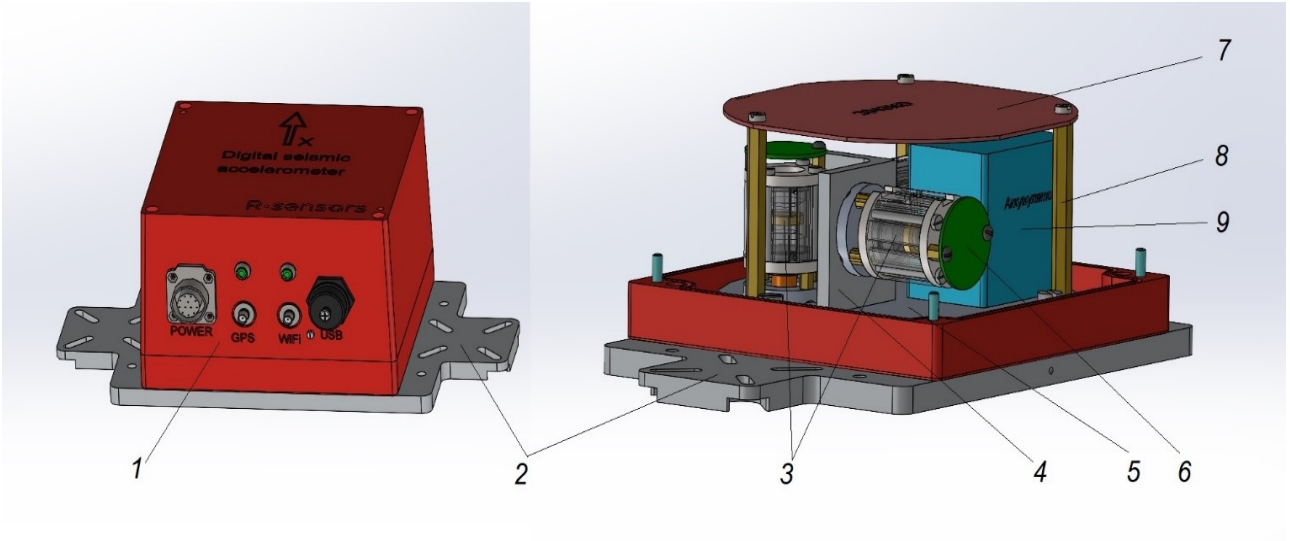


Рис. 1. Модель устройства, разработанная с помощью программы 3D-моделирования: *1* — корпус устройства, *2* — площадка для установки крепления к БПЛА, *3* — молекулярно-электронный датчик — геофон, *4* — кронштейн, *5* — основание, *6* — плата усилителя сигнала, *7* — плата оцифровки сигнала, *8* — межплатная стойка.

В данной работе представлен результат разработки электронного измерительного устройства, представляющего собой сейсмический нод (рис. 1), обладающий следующими ключевым характеристиками: широкая полоса регистрации (1–300 Гц), высокий коэффициент преобразования первичного датчика 250 В/м/с, динамический диапазон цифровой системы >130 дБ, малое потребление <0.5 Вт[1], механическая прочность модуля и отсутствие жестких требований к условиям его установки, небольшой вес и габариты. Указанный набор параметров можно рассматривать как наиболее полно соответствующий требованиям для использования в составе системы совместно с беспилотными летательными аппаратами.

Для реализации функции контроля качества данных разработан протокол, использующийся для автоматизированного обмена командами и данными с БПЛА. Дальность действия Wi-Fi позволяет БПЛА установить связь с модулем, находясь на высоте до ста метров. Компьютер БПЛА, после установки беспроводного соединения, может запросить состояние модуля, изменить параметры регистрации, произвести тестовую запись сигнала.

Для проверки частотных характеристик датчика и исправности регистрирующего тракта, в целом, с встроенного в БпЛА одноплатного компьютера Raspberry Pi подается команда о запуске калибровочного сигнала в качестве которого применяется десятисекундный импульс заданной амплитуды. Данные, соответствующие отклику датчиков, отправляются обратно на Raspberry Pi. Пример такого отклика показан на рис. 2.

Далее на одноплатном компьютере запускается программа, которая находит минимум и максимум сигнала. Вычисляя между ними разницу по вертикали — величину отклика, а также разницу по оси времени — его длительность, сравнивает полученные значения с соответствующими эталонными величиной. Допустимое отклонение могут быть выставлены в программе. Обычно, приемлемым считается отклонение в пределах ±5%. В зависимости от результата проверки выводится сообщение об исправности или неисправности датчиков.

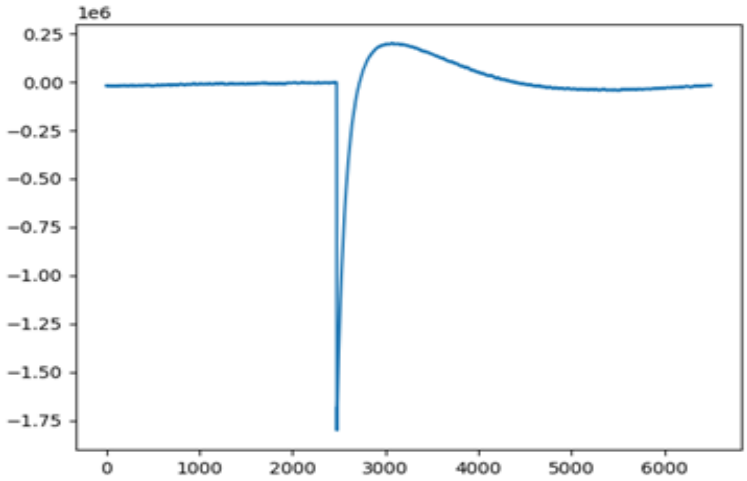


Рис. 2. Отклик датчика на тестирующее воздействие

По завершении взаимодействия с нодом, в зависимости от пилотного задания, БпЛА либо перемещается к следующему устройству, повторяя описанный выше алгоритм, либо возвращается на командный пункт для просмотра и обработки оператором собранных данных.

Работа выполнена при поддержке РНФ. Проект № 22-19-00211.

Литература

1. *Agafonov V. M.* [et al.] Operating principles and technical characteristics of a small-sized molecular-electronic seismic sensor with negative feedback // Seism. Instr. 2014. V. 50(1). P. 5–8. DOI: 3103/S0747923914010022.

УДК 53.092, 53.093, 53.096

Зависимость изменения радоновых данных с детектора LVD от параметров давления, влажности, температуры

Н. Ю. Агафонова, В. В. Ашихмин, Е. А. Добрынина, Р. И. Еникеев, И. Р. Шакирьянова, В. Ф. Якушев, Н. А. Филимонова (от имени коллаборации LVD)

Институт ядерных исследований РАН

Эксперименты по поиску темной материи, двойного безнейтринного бета-распада, гео-нейтрино располагаются в лабораториях глубоко под землей. Однако же трудноустранимым фоном являются гамма-кванты и нейтроны от естественной радиоактивности и грунта. В цепочках распада урана, тория и калия, находящихся в земле, содержится радиоактивный газ радон, период полураспада которого составляет 3,8 суток. Радон поступает в помещение лаборатории вместе с грунтовыми газами и, возможно, с водой в процессе адвекции под влиянием разности давлений в грунте и в помещении, а также благодаря диффузии. При изменении атмосферного давления начинается выход газов из поверхностных слоев стен и грунта.

Целью данной работы было выявить существует ли прямая связь между изменением давления, влажности и температуры в лаборатории Гран Сассо и выходом радона из грунта.

Эксперимент проводился в центральной части Италии в подземной части лаборатории Гран Сассо на детекторе LVD (Large Volume Detector). Основной задачей эксперимента является поиск нейтринного излучения от Сверхновых. Также LVD (Large Volume Detector) постоянно измеряет темп счета радиоактивного фона, выходящего из грунта, в основном радона [1].

Установка регистрирует гамма-кванты от цепочки распада радона, главным образом ^{214}Bi. Энергия этих γ-кантов от 0,5 до 3 МэВ [2].

Детектор состоит из 3 башен, разделенных коридорами шириной 2 м, по 5 колонн в каждой. Масса железа и сцинтиллятора в установке составляет по 1 кт. LVD состоит из 840 сцинтилляционных счетчиков, которые представляют собой контейнеры из нержавеющей стали размерами 100×100×150 см^3, заполненные жидким сцинтиллятором на основе уайт-спирита.

В 2019-2020 гг. на один из счетчиков детектора LVD был установлен прибор по измерению давления, влажности и температуры внутри помещения лаборатории: термогигрометр ИВТМ-7М-6Д.

Данные по атмосферному давлению, пересчитанные к уровню моря, в ближайшей к лаборатории Гран Сассо точке (расстояние 10,3 км) мы взяли из базы данных ERA5, предоставляемой Европейским центром среднесрочных прогнозов погоды (ECMWF) за последние 7 десятилетий. Полный анализ данных доступен, начиная с 1940 года по настоящее время [3]. База данных ERA5 содержит в себе ежечасовые оценки большого количества параметров атмосферы, океанских волн и поверхности суши, они обновляются ежедневно с задержкой около 5 дней. Данные пересчитываются в регулярную сетку с ячейками широты и долготы по 0,25 градуса для повторного анализа и 0,5 градуса для оценки неопределенности (0,5 и 1 градус соответственно для океанских волн).

В первую очередь искались корреляции между атмосферным давлением и давлением в помещении лаборатории Гран Сассо. Частота измерений — 1 раз в час. Период измерений — с 15 мая 2019 года по 28 февраля 2020 года. Коэффициент корреляции Пирсона составил 0,95. Сдвиг данных по времени относительно друг друга задержку не выявил. Максимум распределения приходится на 0 часов. Далее, мы построили функцию распределения плотности от разницы давлений (атмосферное давление минус давление в помещении лаборатории). Разница между давлениями составила 82,6±1,7 мм. рт. ст.

Также мы решили посмотреть существует ли зависимость между радоновыми данными детектора LVD (выбрали первую башню) и данными, полученными с помощью термогигрометра. Было выбрано три периода измерений: с 1 июня 2019 года по 25 июля 2019 года, с 21 сентября 2019 года по 4 ноября 2019 года и с 6 ноября 2019 года по 20 января 2020 года. Выбор таких периодов обусловлен тем, что в это время термогигрометр находился на одном и том же счетчике детектора LVD. Коэффициенты корреляции Пирсона для первой башни составили в паре температура-радоновые данные –0,031, влажность-радоновые данные 0,054, давление-радоновые данные –0,025.

Для первого периода измерений сдвиг по времени одних данных относительно других во временном промежутке ± 10 суток выявил следующие уровни максимума и минимума коэффициентов корреляции Пирсона: в паре давление-радоновые данные –0,375 для времени 198 часов, в паре влажность — радоновые данные –0,287 для времени 50 часов, в паре температура-радоновые данные 0,318 для времени –177 часов (рис. 1).

Для второго периода измерений сдвиг по времени во временном промежутке ±10 суток выявил следующие уровни максимума и минимума коэффициентов корреляции Пирсона: в паре давление-радоновые данные 0,318 для времени –70 часов, в паре влажность — радоновые данные –0,204 для времени 117 часов, в паре температура-радоновые данные –0,152 для времени 100 часов.

Для третьего периода измерений сдвиг по времени во временном промежутке ±10 суток выявил следующие уровни максимума и минимума коэффициентов корреляции Пирсона: в паре давление-радоновые данные –0,165 для времени 87 часов, в паре влажность — радоновые данные –0,181 для времени –179 часов, в паре температура-радоновые данные –0,078 для времени 0 часов.

Так как мы нашли прямую взаимосвязь между давлением внутри лаборатории Гран Сассо и атмосферным давлением, было принято решение искать корреляции между радоновыми данными детектора LVD и атмосферным давлением за период с 2009 по 2021 гг. В этот период вентиляция в лаборатории работала в одном и том же режиме. Коэффициенты корреляции Пирсона составили для первой башни -0,076, для второй башни — 0,051, для третьей башни — 0,042. Сдвиг данных по атмосферному давлению относительно радоновых данных LVD во временном промежутке ± 20 суток выявил следующие уровни максимума и минимума коэффициентов корреляции Пирсона: для первой башни –0,088 для времени –265 часов, для второй башни –0,067 для времени –337 часов, для третьей башни –0,067 для времени –338 часов.

Таким образом, была получена прямая зависимость между данными по давлению внутри помещения лаборатории Гран Сассо и атмосферным давлением на уровне моря. Разница составила 82.6 ± 1.7 мм рт. ст. Максимум приходится на нулевой сдвиг по времени (точность 1 час). В рамках текущего анализа не найдена зависимость выхода радона из грунта лаборатории от условий изменения давления, влажности или температуры, измеренного термогигрометром на LVD с мая 2019 года по февраль 2020. Сдвиг по времени также зависимости не выявил. За период с 2009 по 2021 гг. не найдена прямая зависимость выхода радона из грунта лаборатории Гран Сассо от изменения атмосферного давления. Сдвиг по времени зависимости также не выявил.

Тем не менее есть указание на связь выхода радона с давлением в летнем периоде набора данных. Зимние периоды же характерны резкими перепадами атмосферного давления и циклонами в разных местах Итальянского полуострова. На всем диапазоне измерений с 2009 по 2021 гг. эффекты замазываются и корреляций с давлением нет.

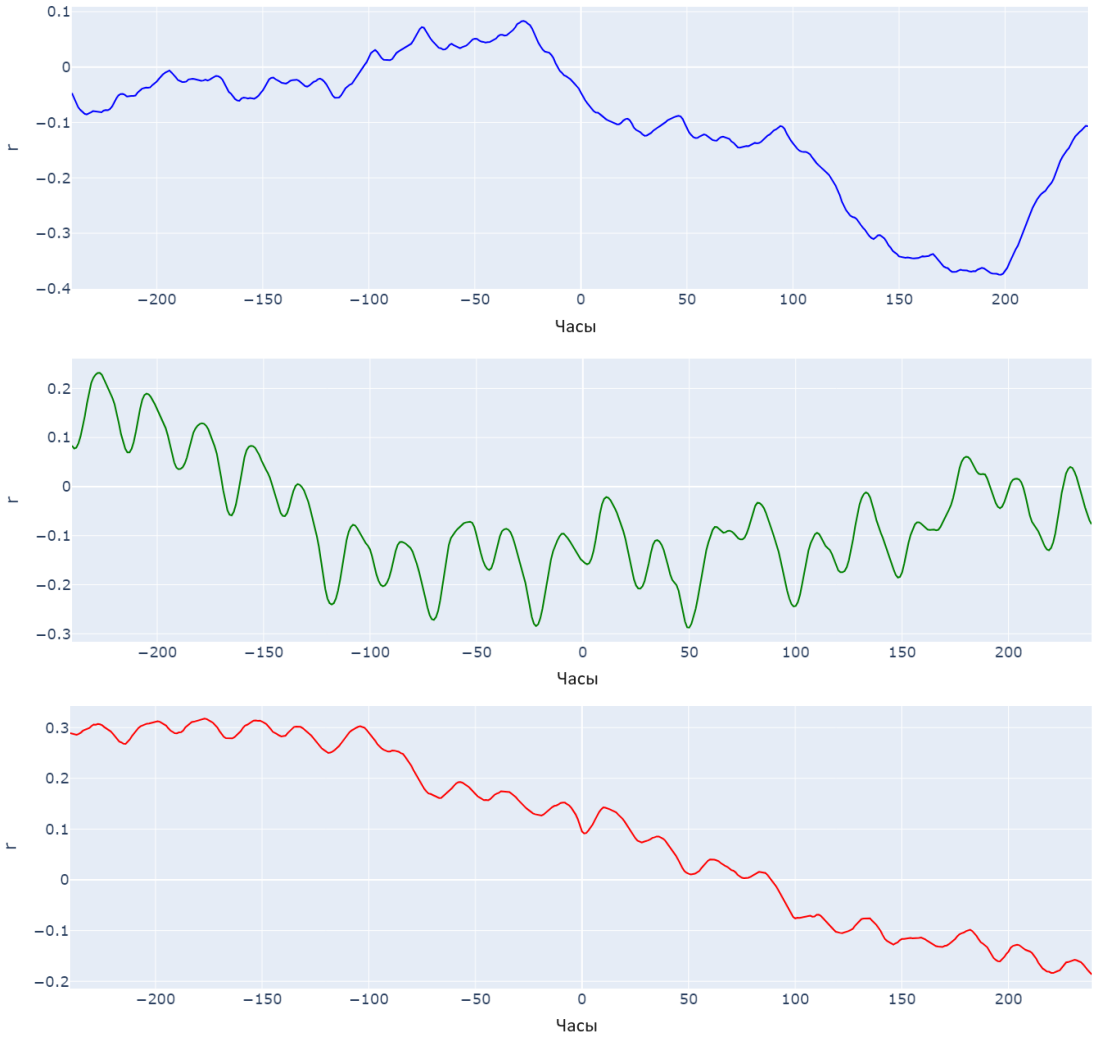


Рис. 1. Распределение коэффициентов корреляции Пирсона (r) для пар радоновые данные-давление (синяя линия), радоновые данные-влажность (зеленая линия), радоновые данные-температура (красная линия) в зависимости от сдвига по времени для первого периода измерений с 1 июня 2019 года по 25 июля 2019 года

Исследование выполнено при финансовой поддержке по гранту Российского научного фонда 23-22-00048, https://rscf.ru/project/23-22-00048.

Литература

1. *Bari G.* [et al.]. The large-volume detector (LVD) - a multipurpose underground detector at Gran Sasso // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 1989. V. 277. P. 11–16.
2. *Агафонова Н. Ю.* [и др.]. Изучение вариаций концентрации радона под землей с помощью установки LVD. Препринт. — М.: ИЯИ РАН, 2001.
3. Официальный сайт базы данных ERA5 [Электронный ресурс] URL: https://cds.climate.copernicus.eu (дата обращения 23.04.2023).

УДК 550.8

Особенности взаимосвязей механических и электрических свойств горных пород с учетом вечной мерзлоты

Л. Р. Календарова

Институт физики Земли имени О. Ю. Шмидта РАН

Разработка территорий арктической зоны нашей планеты является стратегически важным направлением для всей мировой экономики, поэтому в настоящий момент уделяется большое внимание

решению проблем, сопутствующих добыче, с помощью разрабатываемых отечественных технологических решений. Вечная мерзлота широко распространена как на суше, так и на шельфе в Арктическом регионе.

Геофизические методы, в частности изучение электрических и механических свойств горных пород, широко используются для исследований вечной мерзлоты как в лабораторных условиях, так и при проведении полевых работ. Целью данной работы является использование результатов анализа существующих методов построения моделей физических свойств пород для определения основных требований к моделям, применимым для условий вечной мерзлоты, и формулировки предложений по направлениям их развития.

Определение взаимосвязи электрических и механических свойств горных пород происходит посредством эмпирических зависимостей, которые определяются для различных составов горных пород и различных пластовых условий. Так, например, верхние и нижние границы, полученные методом Хашина-Штрихмана могут быть использованы для определения пористости, в следствие чего представляется возможным использование границ модулей упругости для получения взаимосвязи между механическими и электрическими свойствами [2]. Используемые эмпирические уравнения для определения взаимосвязи свойств должны входить в теоретические границы Хашина-Штрихмана, а также должны быть опробованы на реальных данных.

При использовании модели горная порода-вода-газ, возможно использовать существующие теоретические и эмпирические зависимости, тогда как при работе с вечной мерзлотой добавляется еще одно агрегатное состояние. В зонах вечной мерзлоты поры горных пород заполнены не только водой и газами, но и льдом. Лед и скелет горной породы обладают схожими скоростями продольных волн, в связи с чем дифференциация между льдом и горными породами затруднительна без априорной информации о пористости породы. Эти фазы сложнее различить в отличие от воздуха и воды, у которых довольно узкие и отчетливые диапазоны упругих и электрических свойств (очень низкие значения удельного электрического сопротивления и средние значения скорости у воды; очень высокие значения удельного электрического сопротивления и очень низкие значения скорости у воздуха). Однако чем выше скорость продольных волн в скелете горной породы, тем больше «размах» между скоростями льда и горной породы и тем проще различать две твердые фазы.

Для модели вечной мерзлоты, в которую заложены сведения о составе с помощью закона Арчи и уравнения Тимура, была получена система уравнений с четырьмя неизвестными [1]. Из уравнений прослеживается два подхода: первый, зависимый от пористости, и второй, более общий подход. Эти подходы были исследованы в [1] и были подтверждены выводы о невозможности разделения льда и скелета горной породы без достоверных данных, отображающих пористость. Также важно отметить, что в существующем уравнении Арчи не учитывается сопротивление льда и горной породы. Для корректного построения взаимосвязи при построении необходимо обновить уравнение и учесть электрические характеристики трех непроводящих фаз: воздуха, льда и горной породы.

Огромное внимание при изучении взаимосвязи электрических и механических свойств уделяется зоне протайки-замерзания. Важно уделить внимание изменению характера распределения льда и воды между циклами таяния и замерзания [3].

В условиях вечной мерзлоты, изучение взаимосвязей между механическими и электрическими свойствами горных пород становится особенно важным в контексте изменяющегося климата и увеличения экономической активности в полярных регионах. Эти исследования могут помочь не только в понимании физических процессов, происходящих в горных массивах, но и в разработке инновационных методов для контроля выработки месторождений углеводородов и управления рисками в условиях вечной мерзлоты.

В ходе выполнения аналитической работы было выявлено, что периодическое изменение фазового состояния породы является одним из критических факторов, определяющих соотношения между различными физическими свойствами на разных масштабах. Таким образом, актуализируется задача введения моделей фазового состояния в основные определяющие соотношения. В докладе представлены предварительные методические рекомендации по методике решения этой задачи.

Литература

1. *Hauck C., Böttcher M., Maurer H.* A new model for estimating subsurface ice content based on combined electrical and seismic data sets // The Cryosphere. 2011. V. 5(2). P. 453–468. DOI: 10.5194/tc-5-453-2011.
2. *Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J.* The rock physics handbook. — Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
3. *Wu Y.* [et al.]. Electrical and seismic response of saline permafrost soil during freeze-thaw transition // Journal of Applied Geophysics. 2017. V. 146. P. 16-26. DOI: 10.1016/j.jappgeo.2017.08.008.

УДК 550.832.44, 550.832.53

Обработка ограниченного комплекса ГИС для задач комплексной интерпретации данных на примере верхнефаменского подъяруса в пределах Благовещенской впадины и Южно-Татарского свода

***М. К. Савойская*[1,2]**

[1]Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН
[2]Всероссийский научно-исследовательский геологический нефтяной институт

Одной из существенных частей работ по камеральной обработке и интерпретации сейсмических данных является динамическая интерпретация, которая в большинстве случаев проводится с опорой на скважинные данные. Поэтому в работах, связанных с изучением недр, в рамках камеральных работ преимущественно предусмотрена обработка и интерпретация скважинной информации, составление петрофизического обоснования и проведение флюидозамещения.

На региональном этапе исследований большая часть объектов не обладает скважинами с достаточным комплексом геофизических исследований скважин (ГИС) для подготовки данных к комплексной интерпретации.

Таким образом, возникает потребность в подборе методики для работы с урезанным комплексом ГИС для решения задач подготовки материалов к динамической интерпретации сейсморазведки. Автором была предложена методика, которая в данной работе будет проиллюстрирована на объекте «Региональные сейсморазведочные работы в пределах Благовещенской впадины и Южно-Татарского свода».

Исходные данные представляют собой набор каротажных данных (ограниченный комплекс ГИС) по скважинам, расположенным на территории работ, и каротажные данные (расширенный комплекс ГИС) в скважине недропользователя, расположенной за территорией работ.

Сложность поставленной задачи заключалась в том, что при ограниченном комплексе проведенных геофизических исследований в скважинах остро стоит вопрос о возможности дальнейшего проведения динамической сейсмической интерпретации.

Первая возникающая задача — расчленение разреза по упругим свойствам. Для этого необходимы записанные данные интервального времени прихода продольной и поперечной волн и данные плотностного каротажа. Однако как было сказано выше, в скважинах с территории работ присутствует запись лишь интервального времени прихода продольной волны. В связи с чем возникает задача получения кривой плотности и интервального времени пробега поперечной волны.

Для их получения сперва необходимо решить обратную геофизическую задачу, а именно построить минеральную модель.

Для скважин с территории работ минеральная модель рассчитывалась по методике Н. З. Заляева [1]. Данная методика, несмотря на свои достоинства, имеет и некоторые ограничения. В первую очередь при использовании данного подхода объемная минералогическая модель учитывает только 4 компоненты: глинистую, два минерала матрицы (известняк и доломит) и пористость. Во-вторых, при наличии вторичного пустотного пространства (каверны и трещины) возможны пропуски коллекторов и искажения минеральной модели. Также минеральная модель может быть искажена в интервалах каверн.

По данной методике вещественный состав пород определяется по данным нейтронного гамма-каротажа (НГК) и акустического каротажа (АК) на основе разного влияния скелета пород на эти методы. Показания НГК трансформируются в масштаб, сопоставимый с АК. Получаемые при их сравнении различия являются источником информации об изменении состава пород [1].

В соответствии с полученной минеральной моделью в скважинах, расположенных на территории работ, была рассчитана плотность и интервальное время пробега поперечной волны путем решения прямой геофизической задачи.

Для проверки полученной модели в опорной скважине также необходимо было построить минеральную модель. В данной скважине имеется достаточное количество данных для построения более детальной модели.

Основой применяемой методики является решение системы линейных уравнений, связывающих показание метода в скважине и теоретические значения определяемой компоненты горной породы. Для расчета минеральной модели в опорной скважине использовались показания методов ГК, НГК, АК и (ГГКп). В зависимости от стратиграфической единицы модель включала в себя набор из следующих минералов: кальцит, доломит, иллит, каолинит, сланец, кероген, кварц.

Одним из необходимых условий установления связи амплитудных сейсмических аномалий с различными параметрами является наличие коллекторов.

Выделение коллекторов и определение их эффективных толщин в карбонатном разрезе скважин осуществлялось по комплексу прямых качественных признаков и косвенных количественных критериев.

Получение отсутствующих кривых плотности и скорости поперечной волны позволило провести анализ изменения литологии в поле упругих свойств.

Для анализа изменения литологии были построены двумерные зависимости скоростей упругих волн, их отношения и импедансов от плотности.

После анализа литологии проводится анализ выделения коллекторов в поле упругих свойств. Благодаря разработанной методике данный этап также становится возможным.

Проверка полученных граничных значений проводится с использованием каротажных диаграмм.

Затем обычно ставится задача поиска зависимости между пористостью и упругими свойствами (конкретно акустическим импедансом).

Следующий этап подготовки материалов ГИС для выполнения динамической интерпретации сейсмических данных — выполнение флюидозамещения.

На основе соотношений Гассманна (Gassmann) модели эффективных сред адаптируются для моделирования флюидозамещения. Соотношения Гассманна связывают между собой упругие параметры пористой среды, насыщенной флюидом [2].

Таким образом, флюидозамещение проводится в несколько этапов:

расчет модулей всестороннего сжатия и сдвига твердой фазы пород;

расчет модуля всестороннего сжатия каждого из флюидов и их смеси;

моделирование различных вариантов насыщения коллектора на основе соотношений Гассманна;

расчет кривых скоростей упругих волн и плотности для полученных моделей.

Однако для данного разреза флюидозамещение по Гассманну не показало хороших результатов. В связи с чем акустические параметры были рассчитаны по аналогии с расчетом минеральной модели.

Были рассчитаны модели с насыщением нефть-вода (от 0%-ого насыщения нефтью до 100%-го насыщения нефтью) для пород верхнефаменского подъяруса (D3fm3) по одной из скважин с территории работ.

Проблема недостаточного комплекса ГИС при решении задач регионального геологического изучения по данным старого фонда стоит достаточно остро. В связи с чем возникает вопрос о возможности проведения динамической интерпретации данных сейсморазведки, поскольку она опирается на результаты интерпретации именно скважинных данных.

В данной работе автором было показано, как с помощью использования методики Н. З. Заляева по построению минеральной модели можно получить все необходимые результаты, применив следующий порядок действий:

получение глинистой компоненты модели путем расчета коэффициента глинистости;

получение компонент матрицы путем синтеза из нейтронного гамма-каротажа кривых времени пробега продольной волны, нормированных на матрицы доломита и кальцита для карбонатного разреза;

расчет общей и эффективной пористости;

построение детальной минеральной модели и минеральной модели по методике Н. З. Заляева в опорной скважине с расширенным комплексом ГИС с целью оценки применимости данного подхода на изучаемой территории работ.

Таким образом, даже в условиях ограниченного комплекса ГИС возможно восстановить модель среды, которая в свою очередь позволяет выполнить обработку комплекса ГИС для задач комплексной интерпретации данных.

Литература

1. *Заляев Н. З.* Методика автоматизированной интерпретации геофизических исследований скважин. — Минск: Университетское, 1990.
2. *Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J.* The Rock Physics Handbook. 2-nd Edition. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2009.

УДК 534.08

Исследование зависимости чувствительности электрохимического датчика движения планарного типа от толщины рабочего канала

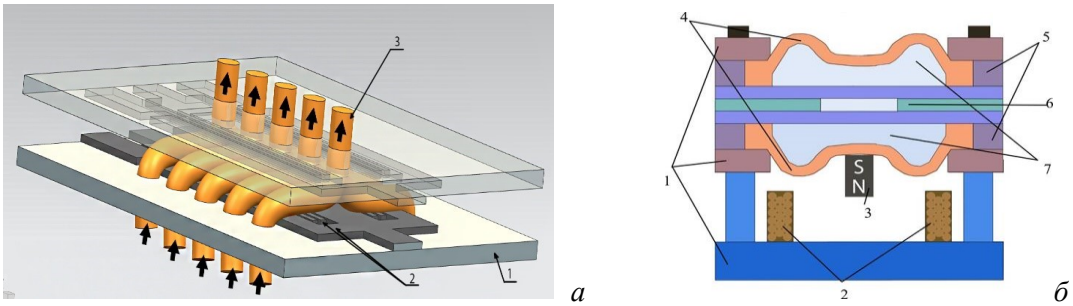
М. В. Кирилловичев, В. В. Левчук

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

В последние годы широкое применение в создании приборов для исследования сейсмичности Земли нашла технология измерения параметров движения и механических волновых полей, основанная на принципах молекулярно-электронного переноса. На основе этой технологии создано семейство приборов для очень широкого спектра применений: сейсмометров, акселерометров и геофонов [1–5]. Одним из перспективных кандидатов для реализации данных приборов является молекулярно-электронный датчик планарного типа.

Конфигурация электрохимической ячейки (рис. 1*а*) такого датчика формируется двумя параллельно расположенными пластинами, разделенных фторопластовой прокладкой заданной толщины. На каждой пластине изготовлены электроды в виде параллельных проводящих дорожек с заданным зазором между ними. Также в верхней и нижней пластинах изготовлены отверстия, обеспечивающие доступ рабочей жидкости к электродам, которая заключена в объеме между мембранами датчика (рис. 1*б*). Известно, что чувствительность прибора такого типа, то есть его коэффициент преобразования, зависит как от толщины прокладки, так и от величины зазора между электродами [6].

Целью данной работы является поиск оптимальных геометрических параметров прибора: толщины прокладки, при которой достигается максимум коэффициента преобразования.



а *б*

Рис. 1. Схема чувствительного элемента (*а*): *1* — пластина, *2* — электроды, *3* — линии течения жидкости. Схема собранного датчика (*б*): *1* — фланцы и катушкодержатель, *2* — катушка, *3* — магнит, *4* — мембраны, *5* — ограничительное кольцо, *6* — фторопластовая прокладка, *7* — раствор электролита

Опытные образцы имели 4 варианта величины зазора между электродами: 200, 100, 50, 10 мкр. Для каждого варианта расстояний было изготовлено три образца чувствительных элементов. Толщину рабочего канала задавали с помощью прокладок из Фторопласта. Всего использовалось 4 типа прокладок с толщинами: 0,4; 0,2; 0,1; 0,06 мм. При измерениях с выхода ЦАП подавался синусоидальный сигнал на катушку электромагнитного актуатора сопротивлением 150 Ом, амплитуда сигнала варьировалась в диапазоне 30–200 мВ, частота варьировалась в диапазоне 0.05–1000 Гц. Актуатор преобразовывал колебания тока в катушке в механическое движение магнита, размещенного на одной из мембран прибора вблизи катушки, что создавало ток электролита внутри преобразующего элемента. Сигнал с датчика считывал 16-разрядный АЦП (компания National instruments модель NI USB-6215 [7]). Полученные данные обрабатывались для получения амплитудно-частотной характеристики датчика. Зависимость коэффициента преобразования при заданной частоте сигнала 0,01 Гц от толщины прокладки представлена на рис. 2 для каждого зазора между электродами: проведя сравнение характеристик для каждой конфигурации преобразующего элемента, можно видеть, что наибольшими показателями чувствительности обладают приборы с прокладкой толщиной 0,1 мм.

На рис. 3 приведена зависимость чувствительности (отношение тока с АЦП к току в катушке) от частоты сигнала на выходе ЦАП, для приборов с зазором между электродами 50 мкр. Анализ показывает, что в диапазоне низких частот преобладает чувствительность приборов с прокладкой толщиной 0.1 мм.

Таким образом, в данной работе впервые выявлена область оптимальных геометрических параметров электрохимического преобразующего элемента планарного типа. Исследование дополняет выводы в ранее опубликованных работах [6, 8]. Практическое значение полученных результатов состоит в определении параметров, которым должны соответствовать изготавливаемые преобразующие элементы для достижения максимальной чувствительности.

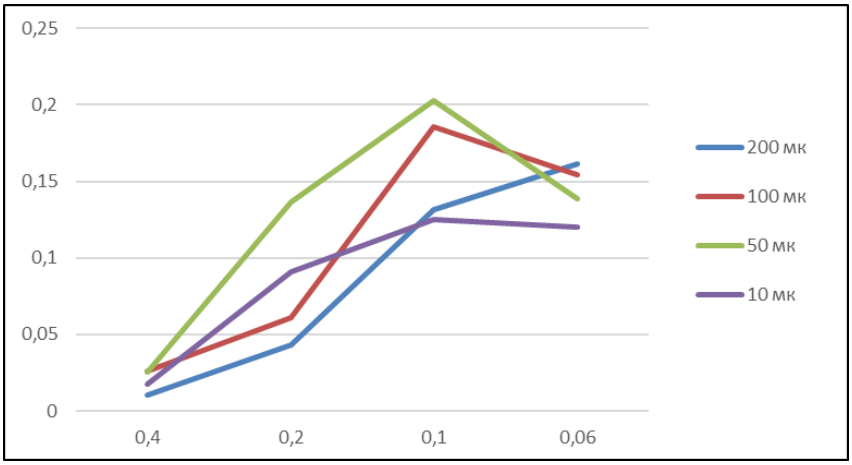


Рис. 2. Зависимость коэффициента преобразования от толщины прокладки (мм)

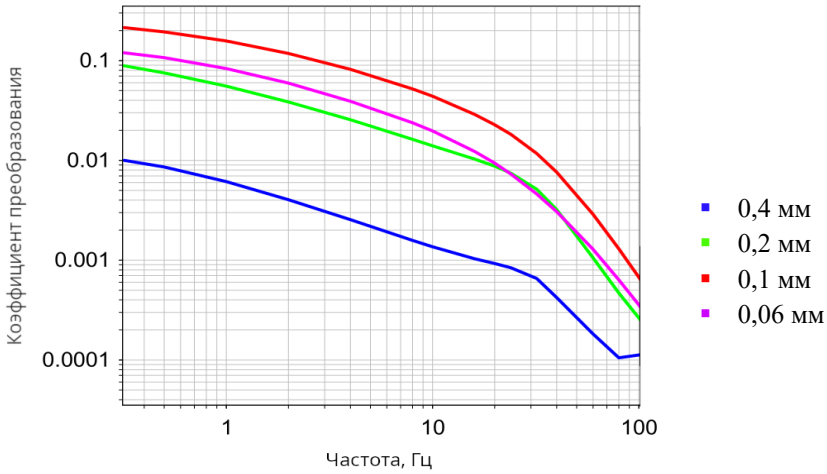


Рис. 3. Частотная характеристика приборов с различными прокладками с фиксированным значением зазора между электродами 50 мкр

Литература

1. *Huang H., Agafonov V., Yu H.* Molecular electric transducers as motion sensors: a review // Sensors (Basel). 2013. V. 13(4). P. 4581–4597.
2. *Agafonov V., Neeshpapa A., Shabalina A.* Electrochemical Seismometers of Linear and Angular Motion // Encyclopedia of Earthquake Engineering. — Berlin–Heidelberg: Springer, 2015. P. 944–961.
3. *Каменев П. А.* [и др.]. Геофизические исследования в южной части Центрально-Сахалинского разлома с использованием нового комплекса оборудования // Геофизика, сейсмология. 2019. V. 3(4). P. 390–402.
4. *Sobisevich A. L.* [et al.]. New-Generation Autonomous Geohydroacoustic Ice Buoy // Seism. Instruments. 2018. V. 54(6). P. 677–681.
5. *Krylov A. A.* [et al.]. Ocean-bottom seismographs based on broadband met sensors: Architecture and deployment case study in the arctic // Sensors. 2021. V. 21(12): 3979.
6. *Левчук В. В., Кирилловичев М. В. [и др.].* Исследование зависимости чувствительности электрохимического датчика движения планарного типа от геометрических параметров электродной системы // Труды МФТИ. 2023. Т. 15(4). С. 140–152.
7. NI. Isolated 16 AI (16-Bit, 250 kS/s), 2 AO (250 kS/s), 4 DI, 4 DO USB Multifunction I/O Device. URL: https://www.ni.com/ru-ru/shop/model/usb-6215.html (дата обращения: 09.12.2023).
8. *Agafonov V.* [et al.]. Modeling of the Electrochemical Motion Sensor Conversion Factor at High Frequencies // Micromachines. 2022. V. 13(153): 153.

УДК 550.3, 551.24

Сегментация Перуанско-Чилийской зоны субдукции и ее влияние на сильнейшие (M≥8) землетрясения

***Н. С. Щевьева*[1], *И. С. Владимирова*[1,2]**

[1]Институт океанологии им. П. П. Ширшова РАН
[2]Федеральный исследовательский центр «Единая геофизическая служба РАН»

Работа посвящена выявлению различий процессов накопления и высвобождения напряжений во время серии сильнейших субдукционных землетрясений (M≥8) в Чили в начале XXI в. на основе анализа спутниковых геодезических данных. Проведено исследование влияния структурных неоднородностей геосерды на указанные процессы во время землетрясений Мауле магнитудой Mw=8.8 27 февраля 2010 г. в Центральном Чили, Икике магнитудой Mw=8.1 1 апреля 2014 г. в Северном Чили и Ильяпель магнитудой Mw=8.3 16 сентября 2015 г в Центральном Чили.

Все три исследуемые землетрясения характеризуются малыми глубинами очага, относительно близкими магнитудами, схожими фокальными механизмами, представляющими собой пологий надвиг с падением в сторону континента [6] и произошли в Перуанско-Чилийской зоне субдукции в прошлом десятилетии в пределах сейсмических брешей [10].

В качестве исходных данных для моделирования очаговых зон землетрясений были использованы трехкомпонентные временные ряды станций Глобальных Навигационных Спутниковых Систем (ГНСС) на Чилийском побережье, предоставленных Геодезической обсерваторией Невады [4].

Полученные распределения подвижек по разрыву являются результатом решения обратной задачи, сводящейся к минимизации среднеквадратической невязки между наблюдаемым спутниковыми методами косейсмическими смещениями $\boldsymbol{u}_{obs}(\boldsymbol{r}_i)$ на наблюдательном пункте в точке $\boldsymbol{r}_i$ и смоделированными косейсмическими смещениями от дислокации $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}_s)$, распределенной по поверхности сейсморазрыва S:

$$\min_{\mathbf{U}(\mathbf{r}_s)} \sum_i \left| \iint_S \mathbf{G}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_s)\mathbf{U}(\mathbf{r}_s)\, dS - \mathbf{u}_{obs}(\mathbf{r}_i) \right|^2 \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_s)$ — функции отклика среды в точке $\boldsymbol{r}_i$ на точечную дислокацию в точке $\boldsymbol{r}_s$. Для поиска непрерывного решения исходное разрывное нарушение S аппроксимируется конечным набором непересекающихся прямоугольных элементов.

Для решения прямой задачи моделирования деформаций вследствие однородной заглубленной дислокации прямоугольной формы в данной работе используется подход к вычислению функции отклика среды для сферически симметричной слоистой модели Земли [8], реализованный в программном пакете STATIC1D [9]. Геометрические размеры очаговых зон землетрясений были определены по границам областей их афтершоков за двухмесячный период (рис. 1*б*, 2*б*, 3*б*). Выделение афтершоков осуществлялось на основе кластерного метода [1], реализованным в программном пакете В. Б. Смирновым [2]. Для более точной аппроксимации очаговых зон были построены поперечные профили зоны Беньофа на основе полиноминальной регрессии (рис. 1*а*, 2*а*, 3*а*). Для этого был использован каталог землетрясений ISC-GEM [7], при создании которого проводилась процедура уточнения глубин гипоцентров сейсмических событий. Построенные профили дают представление о том, как меняется угол наклона зоны Беньофа с ростом глубины, а также вдоль по простиранию зоны субдукции.

Найденные распределения подвижки в очагах землетрясений Мауле 2010 г., Икике 2014 г. и Ильяпель 2015 г. представлены на рис. 1*в*, 2*в*, 3*в*.

Полученный сейсмический очаг землетрясения Мауле характеризуется тремя областями максимальных сейсмических смещений, достигающих 12 м. Основными геологическими структурами в районе очага землетрясения Мауле 2010 г. являются разломная зона Мокка и подводный хребет Хуан Фернандес, образующие сейсмические барьеры, ограничивающие развитие очага землетрясения. Область полуострова Арауко (рис. 1*в*) на протяжении нескольких сотен лет также считалась сейсмическим барьером, разграничивающим разломные зоны сильнейших землетрясений [5]. Однако один из максимумов сейсмических смещений в очаге землетрясения Мауле расположен в области этого полуострова, что противоречит представлениям о его асейсмической природе. В очаговой зоне землетрясения Икике 2014 г. сейсмическая подвижка, достигающая 6 м, локализуется только в северной части, что может указывать на асейсмическое проскальзывание в южной части. Это предположение подтверждается и фактом дефицита афтершоков в южной части очага [3]. Наличие сейсмического барьера в южной части очаговой зоны может быть связано с погружением под Южно-Американскую плиту подводного хребта Икике.

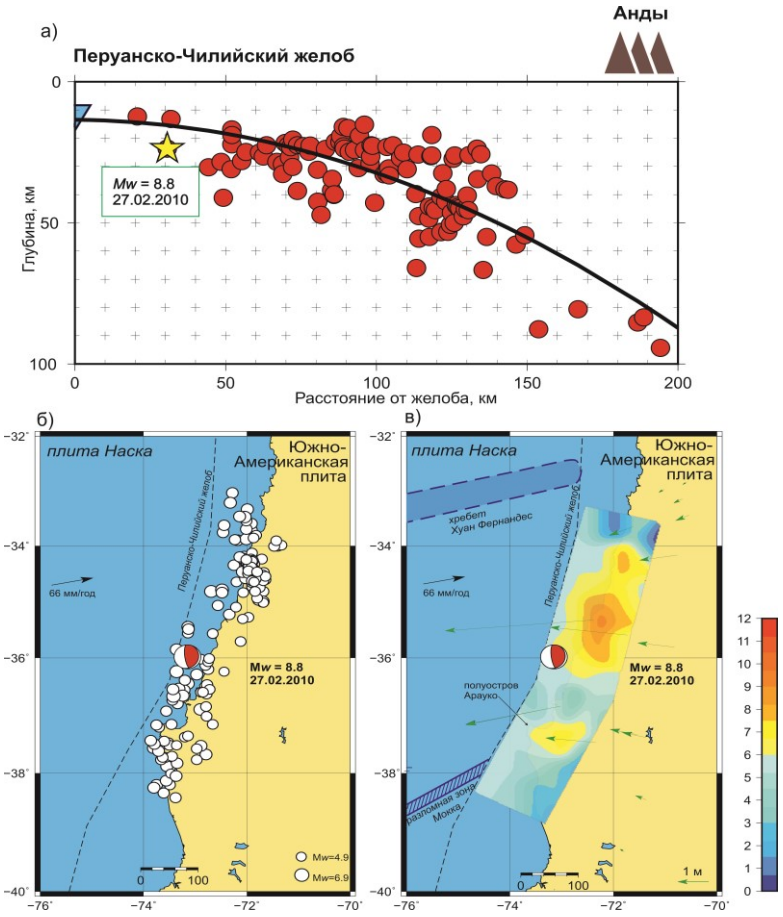


Рис. 1. Поперечное сечение верхних 100 километров Чилийской субдукционной зоны (*а*); афтершоки (*б*) и распределение сейсмической подвижки (*в*) в очаге землетрясения Мауле 27.02.2010

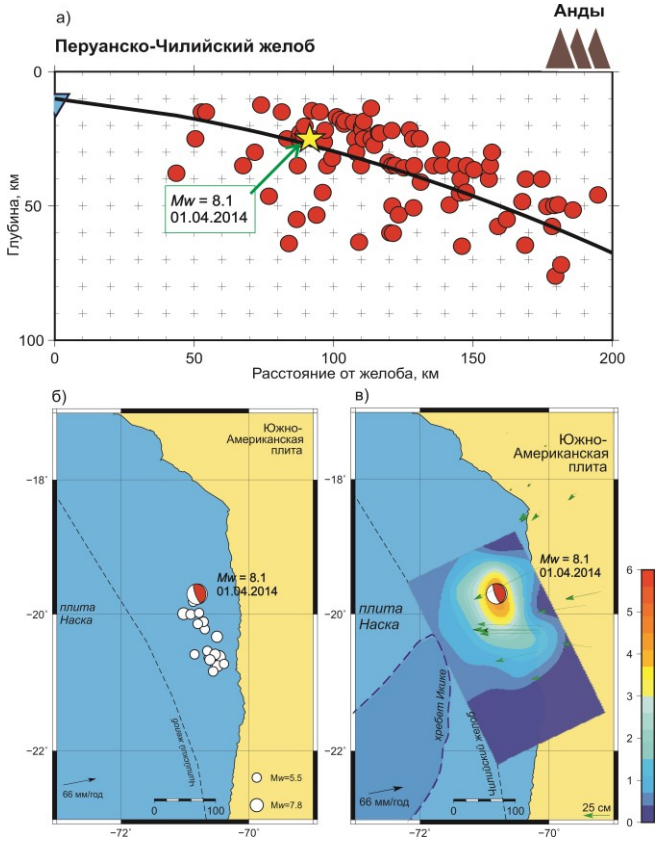


Рис. 2. Поперечное сечение верхних 100 километров Чилийской субдукционной зоны (а), афтершоки (б) и распределение сейсмической подвижки (*в*) в очаге землетрясения Икике 01.04.2014

В очаговой зоне землетрясения Ильяпель 2015 г. сейсмическая подвижка распределена по всей плоскости разломной зоны, убывая от центра к краям. Основными геологическими структурами в районе очага землетрясения Ильяпель являются трансформный разлом Челленджер и подводный хребет Хуан Фернандес, вероятно образующие сейсмические барьеры, ограничивающие распространение сейсморазрыва. При этом хребет Хуан Фернандес разграничивает разломные зоны землетрясений Мауле 2010 г. и Ильяпель 2015 г.

Геоморфологические структуры, такие как подводные горы, зоны разломов и хребты, оказывают непосредственное влияние на процессы накопления и высвобождения напряжений во время сильнейших землетрясений. При этом крупные геологические неоднородности могут ограничивать очаговые зоны землетрясений, а мелкие геологические структуры скорее влияют на локальные изменения деформационных полей.

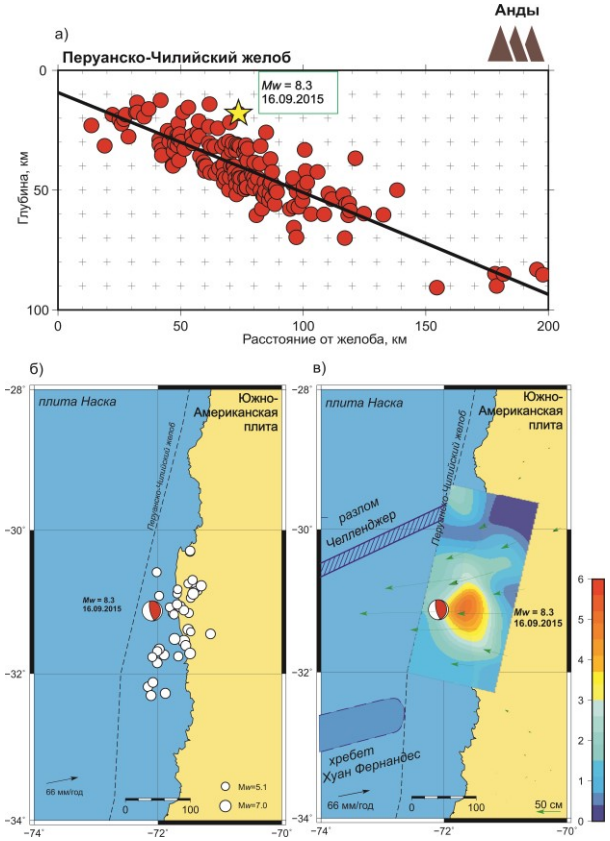


Рис. 3. Поперечное сечение верхних 100 км Чилийской субдукционной зоны (*а*), афтершоки (*б*) и распределение сейсмической подвижки (*в*) в очаге землетрясения Ильяпель 16.09.2015

Литература

1. *Молчан Г. М., Дмитриева О. Е.* Идентификация афтершоков: обзор и новые подходы // Современные методы интерпретации сейсмологических данных. Вычислительная сейсмология. 1991. Вып. 24. С. 19–50.
2. *Смирнов В. Б.* Прогностические аномалии сейсмического режима. I. Методические основы подготовки исходных данных // Геофизические исследования. 2009. Т. 10. № 2. С. 7–22.
3. *Шебалин П. Н.* [и др.]. Дефицит сильных афтершоков как индикатор постсейсмического проскальзывания в очагах землетрясений зон субдукции // Докл. РАН. Науки о Земле. 2021. Т. 498. № 1. С. 81–85.
4. *Blewitt G., Hammond W. C., Kreemer C.* Harnessing the GPS data explosion for interdisciplinary science // Eos. 2018. [Электронный ресурс]. URL: http://geodesy.unr.edu/index.php (дата обращения: 10.10.2023).
5. *Delouis B., Nocquet J.-M., Vallée M.* Slip distribution of the February 27, 2010 Mw = 8.8 Maule Earthquake, central Chile, from static and high-rate GPS, InSAR, and broadband teleseismic data // Geophys. Res. Lett. 2010. V. 37(17). P. 1–7.
6. *Ekström G., Nettles M., Dziewonski A. M.* The global CMT project 2004–2010: Centroid-moment tensors for 13,017 earthquakes // Phys. Earth Planet. Inter. 2012. V. 200-201. P. 1–9.
7. International Seismological Centre. ISC-GEM Earthquake Catalogue 2023. [Электронный ресурс]. URL: http://doi.org/10.31905/D808B825 (дата обращения: 07.11.2023).
8. *Pollitz F. F.* Coseismic deformation from earthquake faulting on a layered spherical Earth // Geophys. J. Int. 1996. V. 125(1). P. 1–14.

9. *Pollitz F. F.* STATIC1D. Software Release. 2019 [Электронный ресурс]. URL: https://www.usgs.gov/node/279409 (дата обращения: 01.09.2023).
10. *Ruiz S., Madariaga R.* Historical and recent large megathrust earthquakes in Chile // Tectonophysics. 2018. V. 733. P. 37–56.

УДК 550.8.056

Влияние давлений и температур на показания индуктивных датчиков перемещений в камере сервогидравлической установки

Н. А. Егоров, И. В. Фокин

Институт физики Земли РАН

Одной из основных задач лабораторных геомеханических испытаний керна является определение упруго-прочностных свойств горных пород при различных напряженно-деформированных состояниях. Поскольку при стандартных геомеханических исследованиях нагружение породы проводится при постоянных заданных температурах и всесторонних давлениях, влияние данных параметров на измерительные системы не оказывается. Необходимость точного измерения деформаций возникает при переменных всесторонних давлениях, - для измерений сжимаемости минерального скелета горных пород и порового пространства с расчетом коэффициента пороупругости Био и для имитации процессов истощения пласта.

Для определения геомеханических свойств горной породы образцы помещаются в условия объемного сжатия [1]. В ходе испытания измеряются осевые и радиальные деформации цилиндрического образца с помощью индуктивных датчиков перемещения LVDT - линейного дифференциального трансформатора с переменным коэффициентом передачи. При измерении деформаций образца в результате объемного сжатия, помимо реальных значений, необходимо учитывать влияние давления и температуры, которые взаимодействуют с конструктивными элементами датчика. Это может привести к искажению показаний датчиков смещения. Кроме этого, если образец помещается в термоусадочную манжету, нужно учитывать ее сжимаемость. Причем чем меньше диаметр исследуемого образца, тем больший вклад в искажение реальных значений деформаций вносит сжимаемость термоусадочной манжеты. При данной технической сложности, которая не позволяет определить реальные деформации, необходимо вводить поправки за давления, температуру и термоусадочную манжету.

В данной работе предложена методика определения поправочных коэффициентов при помощи цилиндрического эталонного образца с известным модулем объемного сжатия. Для этого в качестве эталона предложено использовать алюминиевый образец с термоусадочной манжетой и без нее. Всестороннее давление предлагается изменять циклично до максимально допустимого предела измерения — это более точно позволит определить поправочные коэффициенты.

В работе отмечено, что при увеличении всестороннего давления на эталонном образце, датчики смещения регистрируют заниженные значения осевой и радиальной деформаций алюминия, а термоусадочная манжета завышает радиальные деформации. Также на индуктивных датчиках, измеряющих осевую деформацию, наблюдается дрейф значений измерений после изменения всестороннего давления. При первичном объемном сжатии возникают необратимые деформации манжеты, что следует учитывать при геомеханических испытаниях. Рекомендуется использовать “предварительное поджатие” перед испытаниями для более плотной усадки манжеты. На показания индуктивных датчиков перемещения также существенное влияние оказывает изменения температуры внутри камеры, поэтому если эксперименты проводятся в термобарических условиях, то необходима стабилизация показаний после осуществления нагрева до заданной температуры.

Литература

1. *Тихоцкий С. А.* [и др.]. Комплексные лабораторные исследования керна в ЦПГИ ИФЗ РАН // Наука и технологические разработки. 2017. Т. 96. № 2. С. 17–32.

УДК 534.231

Численное моделирование низкочастотного шумового поля на мелководном участке Карского моря

***С. Д. Боджона*[1,2], *Д. Д. Сидоров*[1], *А. А. Луньков*[1]**

[1]Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН
[2]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

С начала текущего тысячелетия наблюдается непрерывный рост доступных для судоходства участков арктических вод. Так, ледяной покров Северного Ледовитого Океана с 2007 года перешел в разряд сезонных, поскольку более половины его площади теперь ежегодно очищается ото льда [1]. Особое внимание приковано к Карскому морю, где улучшение транспортных условий спровоцировало активное развитие разного рода промышленности, в том числе нефтедобывающей. В частности, танкеры, перевозящие углеводородные продукты, совершили 596 транзитов за три года (с 2015 до 2017) по его водам [2]. Резкое увеличение трафика в этих и других арктических акваториях обеспечивает актуальность их изучения.

В ходе сейсмической разведки в мелководной области Карского моря были получены данные о распределении скорости звука в верхнем осадочном слое [3]. Обнаруженные сильные неоднородности в донной структуре, связанные с существованием так называемых водоподобных зон, в которых скорость звука в дне сопоставима со скоростью звука в воде ввиду присутствия небольшого количества газа в осадках, обуславливает важность измерения пространственной изменчивости и направленности окружающего шума. В данной работе рассматриваются шумы, генерируемые ветровым волнением и судоходством на примере газовоза, как две основные составляющие низкочастотного окружающего подводного шума в этом регионе.

Типичный углеводородный танкер представляет собой судно среднего тоннажа (60 000–70 000 т) и низкой осадкой. Шум при перемещении такого корабля создается преимущественно за счет явления кавитации при вращении гребных винтов [4]. Ветровое волнение задается приповерхностными (z_s = 0.7 м) низкочастотными источниками интенсивностью 50 дБ отн. 1 мкПа при частоте 500 Гц с произвольной фазой, и расположенные на расстоянии 1 м друг от друга по всем направлениям. Такой шум порождается главным образом обрушением волн на поверхности океана. В качестве приемника выступает вертикальная цепочка гидрофонов (антенна), перегораживающая весь водный слой по глубине.

Поле шумовых источников ветрового волнения вычислялось методом широкоугольного параболического уравнения с помощью кода RAM в MATLAB [6] с использованием принципа взаимности. Для определения суммарного уровня шума, зависящего от скорости ветра, применяется формула:

$$P_{noise}(z_r) = \sum_{l=1}^{L} exp(ia_l) \sum_{j=1}^{J} \exp\left(ib_j\right) \left(ns_{j,l}\right)\sqrt{S_{area}}P\left(z_r, r_j, z_s, \beta_l\right),$$

где L — количество рассматриваемых направлений (акустических трасс), J — количество источников шума, расположенных вдоль одного направления, $ns_{j,l}^2$ — их интенсивность на единицу площади поверхности, $S_{area} = \Delta r \Delta \beta r_j$ — площадь отдельного элемента сектора, с помещенным в нем шумовым источником, a_l и b_j — случайные величины в диапазоне от 0 до 2π распределенные равномерно между источниками, задающие значения фазы; $P(z_r, r_j, z_s, \beta_l)$ — комплексное акустическое давление, формируемое источником единичной амплитуды, в точке расположения приемника $R(0, z_r)$ для одной из акустических трасс с номером l. В случае танкера (одиночного источника) формула (1) вырождается в выражение:

$$P_{noise}(z_r) = (ns)P\left(z_r, r_j, z_s, \beta_l\right).$$

Для численного моделирования уровня шума газовоза используется модель из монографии [5], в рамках которой источник звука располагается на глубине z_s = 6 м, а его интенсивность рассчитывается по формуле:

$$ns^2 = {p_0}^2 \cdot 10^{(SSL(f,st)/10)},$$

где $SSL(f, st)$ — уровень интенсивности источника в дБ отн. p_0 = 1 мкПа, зависящий от частоты и типа корабля [4]. В данной работе рассматривается частота f = 95 Гц, $SSL(f, st) \approx 167.5$ дБ отн. 1 мкПа.

Расчеты были проведены для трех точек Карского моря с разными характеристиками дна: с высокой скоростью звука (акустически жесткое дно), со скоростью, близкой к скорости звука в воде (водопо-

добное дно), и смешанный тип, на расстоянии до 5 км (см. рис. 1). В каждой из выбранных областей получены нормированные диаграммы направленности шума ветрового волнения в горизонтальной плоскости, усредненные по глубине (рис. 2), и кривые спадания шума корабля с расстоянием (рис. 3).

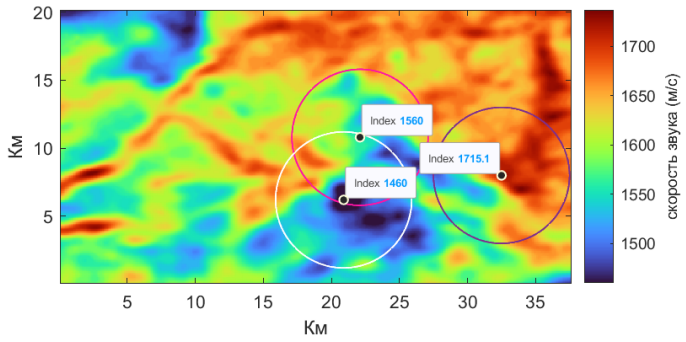


Рис. 1. Области Карского моря, для которых были проведены расчеты шума ветрового волнения. Псевдоцветом обозначены значения скорости звука в дне на горизонтальном разрезе на глубине z = 55м

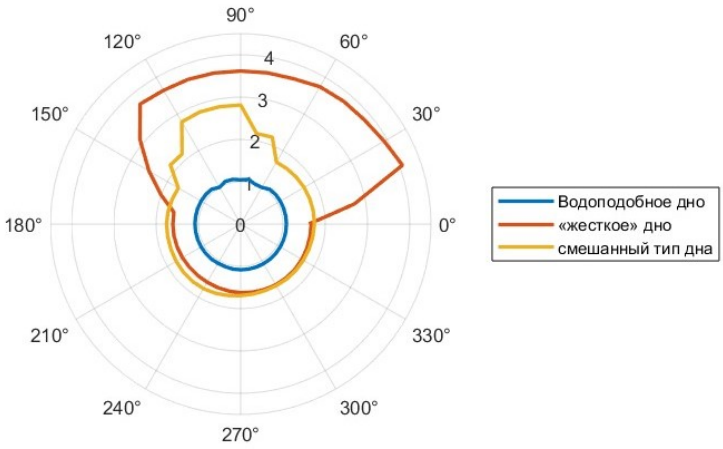


Рис. 2. Нормированные горизонтальные диаграммы направленности шума ветрового волнения при частоте f = 500 Гц для волноводов в Карском море с разными донными структурами

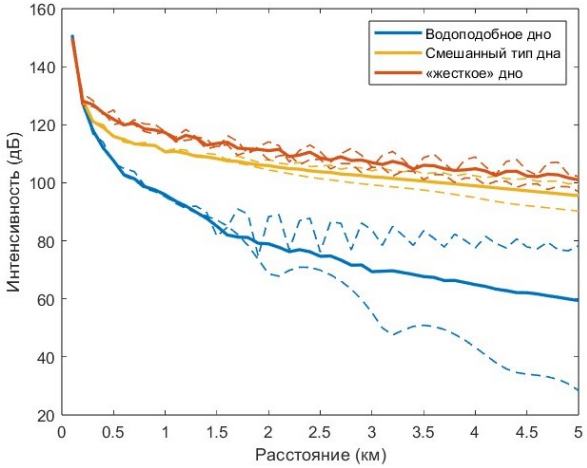


Рис. 3. Спадание с расстоянием уровня шума корабля (среднее значение и разброс возможных значений) в областях с разными донными структурами

Результаты численного моделирования показали значительную зависимость потерь (до 80 дБ) в интенсивности с расстоянием от свойств морского дна в области, окружающей одиночный приповерхностный антропогенный источник шума (танкер). В то же время уровень естественного шума распределенных источников (ветровых волн) продемонстрировал слабую зависимость от параметров дна (не более 3 дБ) и направления в горизонтальной плоскости.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10121, https://rscf.ru/project/22-72-10121.

Литература

1. *Иванов В. В.* [и др.]. Арктический ледяной покров становится сезонным? // Исследование земли из космоса. 2013. № 4. С. 50-65. DOI: 10.7868/S0205961413040076.
2. *Silber K. T., Adams J. D.* Vessel Operations in the Arctic, 2015–2017 // Front. Mar. Sci. 2019. V. 6: 573. DOI: 10.3389/fmars.2019.00573.
3. *Григорьев В. А.* [и др.]. Распространение звука в мелком море с неоднородным газонасыщенным дном // Акуст. журн. 2018. Т. 64. № 3. С. 342–358. DOI: 10.7868/S032079191803005X.
4. *Carey W. M., Evans R. B.* Ocean ambient noise: measurement and theory. — Springer Science & Business Media, 2011.
5. *Pflug L. A., Thompson C., Hall T.* Dynamic Ambient Noise Model (DANM) Evaluation Using Port Everglades Data. — Naval Research Laboratory, 2004.
6. *Collins M. D.* A self-starter for the parabolic equation method // J. Acoust. Soc. Am. 1992. V. 92(4). P. 2069–2074. DOI: 10.1121/1.405258.
7. *McKenna M.F., Ross D., Wiggins S.M.* [et al.]. Underwater radiated noise from modern commercial ships // J. Acoust. Soc. Am. 2012. V. 131(1). P. 92–103. DOI: 10.1121/1.3664100.

УДК 53.087.92

Исследования температурного поведения молекулярно-электронных преобразователей на основе водно-спиртовых электролитов

С. М. Гужов, Д. Л. Зайцев

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Развитие современных методов сейсмического и геофизического мониторинга предъявляет все более высокие требования к аппаратурным средствам регистрации сигналов. Технологии на основе молекулярной-электроники обладают целым рядом преимуществ: высокая чувствительность преобразования сигнала, низкий уровень собственных шумов систем, надежность и простота эксплуатации. В основе работы молекулярно-электронных преобразователей (МЭП) параметров движения лежит явление конвективной диффузии активных носителей заряда в растворах электролитов. В то же время использование в качестве рабочей среды — жидкости в приборах на основе МЭП ставит важнейшие задачи исследования параметров молекулярно-электронных систем в расширенном температурном диапазоне, поиска материалов и решений для низкотемпературной эксплуатации устройств на основе МЭП с сохранением высоких технических характеристик изделий.

В современных датчиках в качестве рабочей жидкости традиционно используется водный раствор электролита на основе йодида калия (KI) в концентрации 4 моль/литр. Приборы, заполненные таким электролитом, имеют доказанный пониженный уровень собственных шумов и относительно низкую температурную чувствительность. В то же время, такой электролит не токсичен, стабилен, широко представлен на рынке и прост в изготовлении. Однако температура его замерзания составляет около –15°C, что является серьезным ограничением для многих областей применения. В настоящей работе приведены результаты температурных исследований работы МЭП с применением нового типа электролитических растворов йодида калия на водно-спиртовой основе. Были изучены электролиты с разным содержанием спирта, йодида калия и молекулярного йода (I_2). В работе экспериментально измерялись амплитудно-частотные характеристики МЭП, заполненных новым типом электролитов с различной концентрацией составных частей растворов и зависимости фоновых токов МЭП от температуры окружающей среды. Зависимость натурального логарифма фонового тока от обратной температуры представлена на рис. 1.

Новые растворы электролитов имеют температурный диапазон работы МЭП до –40°C. Так же на основе полученных экспериментальных данных сделаны выводы о температурной чувствительности исследуемых образцов электролитов, вычислены соответствующие энергии активаций, результаты приведены в табл. 1. Полученные результаты будут использованы для уточнения модели температурного поведения электрохимической части передаточной функции МЭП.

Работа выполнена при поддержке РНФ. Проект № 22-19-00211.

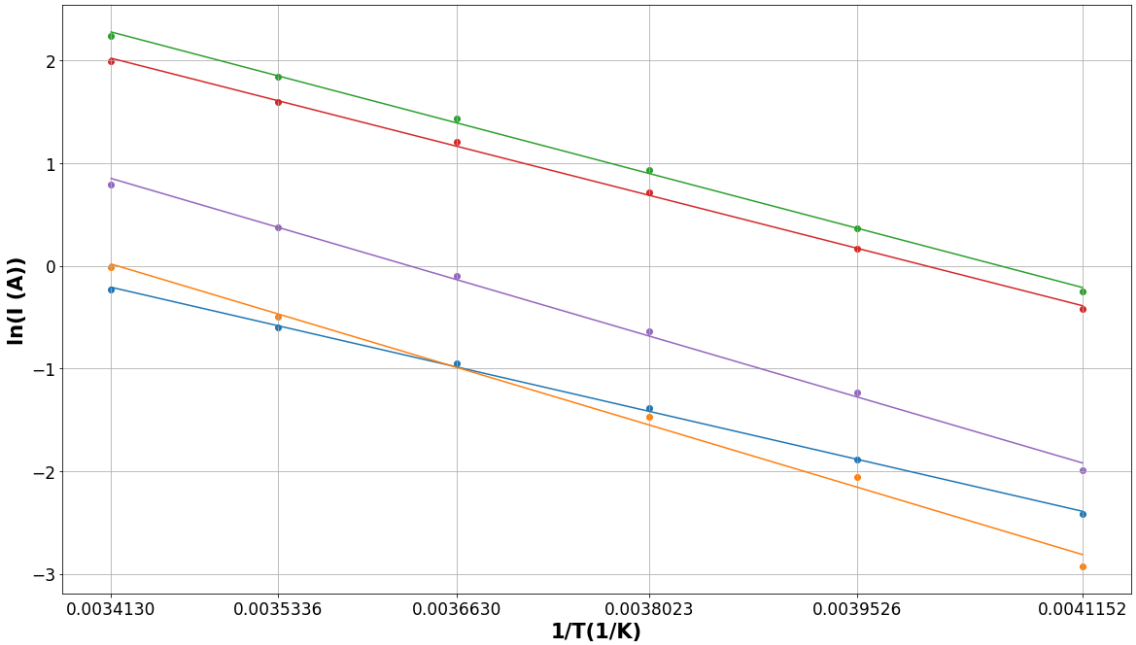


Рис. 10. Зависимость логарифма фонового тока от обратной температуры

Таблица 2. Энергии активации при разных концентрациях составных частей

Доля спирта в растворе (%)	Концентрация *KI* (моль/л)	Концентрация I_2 (моль\л)	Значение энергии активации E_a (K)
25	2	0,2	3544
50	2	0,2	3433
50	1,2	0,1	3946
50	2	0,05	4030
25	2	0,05	3107

Литература

1. *Bugaev A. S., Antonov A. N., Agafonov V. M.* Measuring Devices Based on Molecular-Electronic Transducers // J. Commun. Technol. Electron. 2018. V. 63. P. 1339–1351. DOI:10.1134/S1064226918110025E.
2. *Zaitsev D. L.* [et al.]. Experimental Studies of Temperature Dependence of Transfer Function of Molecular Electronic Transducers at High Frequencies // IEEE Sensors Journal. V. 16(22). P. 7864–7869. DOI: 10.1109/JSEN.2016.2606517.
3. *Chikishev D. A.* [et al.]. The Temperature Dependence of Amplitude- Frequency Response of the MET Sensor of Linear Motion in a Broad Frequency Range // IEEE Sens. J. 2019. 19(21). P. 9653–9661. DOI: 10.1109/JSEN.2019.2927859.

УДК 550.34.013.4

Двумерные вариационные алгоритмы лучевого трассирования при решении кинематических задач сейсморазведки

Ю. А. Гоманюк, П. Ю. Степанов

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Лучевое трассирование — один из основных подходов к решению кинематических задач сейсморазведки. Прослеживание сейсмических лучей волн разных типов позволяет детально изучить характер распространения упругих волн в сложнопостроенных средах и с высокой точностью рассчитать время пробега волны от источника до любой точки геологической среды, вовлеченной в волновой процесс.

Методы решения кинематических задач сейсморазведки в области лучевого трассирования, развитие которых началось в последние десятилетия XX в., не утратили своей актуальности и в настоящее время [1]. В перечень задач сейсморазведки, решаемых с применением методов лучевого трассирования, входит томографическое восстановление скоростного строения среды, кинематическая миграция данных

метода отраженных волн (МОВ) по опорным отражающим горизонтам, глубинно-скоростное моделирование и многое другое.

В настоящей работе был использован вариационный подход к математическому моделированию кинематики сейсмических волн, разработанный на кафедре сейсмометрии и геоакустики геологического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, который относится к методам лучевого трассирования с заданием начальных условий [2].

Целью работы явилось изучение возможностей и ограничений разработанных вариационных алгоритмов лучевого трассирования при решении прямых и обратных кинематических задач сейсморазведки в двумерных изотропных средах (градиентных и слоистых).

Задача определения лучей в двумерно-неоднородных средах была поставлена и решена как задача Коши для системы дифференциальных уравнений 1 порядка:

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = v\cos\theta \\ \frac{dy}{dt} = v\sin\theta \\ \frac{d\theta(t)}{dt} = v_x\sin\theta - v_y\cos\theta \ , \end{cases} \quad (1)$$

где θ — угол, который составляет касательная к лучу с горизонтальной осью x. Первые два уравнения этой системы определяют пространственные траектории лучей, третье — угол падения луча. Интегрирование системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка (1) осуществлялось методом Рунге–Кутты 4-го порядка точности.

Реализованный авторами вариационный алгоритм лучевого трассирования позволяет детально изучить характер распространения упругих волн в сложнопостроенных средах и с высокой точностью рассчитать время пробега волны от источника до любой точки геологической среды [3]. Еще одной областью применения данного алгоритма является исследование точности решения обратной кинематической задачи. Авторы исследовали алгоритм интерпретации данных метода первых вступлений (МПВ), известный как «метод однородных функций», который позволяет по системе встречных и нагоняющих годографов первых вступлений рефрагированных волн восстановить сейсмогеологический разрез в изолиниях скорости упругих волн [4]. Удобство использования при решении широкого круга задач инженерной и глубинной сейсморазведки, а также отсутствие принципиальных ограничений на используемые входные данные способствовали достаточно широкому внедрению метода однородных функций в практику российских геофизических организаций. При этом задача исследования возможностей и точности метода однородных функций до настоящего времени не была решена в полном объеме, что определило научную новизну и практическую значимость выполненной работы.

На модельных примерах показано, что метод однородных функций дает корректные результаты только для простых сред: вертикально-неоднородных или слоистых со слабо наклоненными границами, а складки или интрузии позволяет восстановить только на качественном уровне [4]. При работе с реальными полевыми данными МПВ, полученными на учебно-научном полигоне отделения геофизики геологического факультета МГУ (д. Александровка Юхновского района Калужской области) установлено, что метод однородных функций корректно восстанавливает скоростное строение разреза до глубины 1/3–1/2 от максимальной глубины проникновения лучей, при этом на получаемых скоростных разрезах имеет смысл интерпретировать только аномалии больших размеров с контрастными значениями скоростей (рис. 1).

Еще одной важной задачей сейсморазведки, решаемой с применением методов лучевого трассирования, является кинематическая миграция данных МОВ по целевым отражающим горизонтам. Анализ опубликованных работ показывает, что большинство использующихся в современной практике алгоритмов кинематической миграции основаны на предположении о том, что скорость распространения сейсмических волн либо постоянна во всей толще выше отражающей границы, либо кусочно-постоянна в пределах каждого пласта [5]. Лучевые траектории в таких средах являются, соответственно, либо прямыми, либо ломаными линиями.

В практике современных сейсмических исследований сложнопостроенных геологических объектов широко используется модель двумерной среды, представляющей собой слоистую толщу с криволинейными границами и переменными пластовыми скоростями. Для данной модели среды на основе вариационной теории лучевого трассирования был разработан алгоритм кинематической миграции, который учитывает искривление сейсмических лучей в слоях, вызванное неоднородностью среды, преломление лучей на промежуточных границах, а также наклон сейсмических границ [6]. Полученные в ходе проведенных численных экспериментов на теоретических моделях результаты продемонстрировали эффективность решения обратной кинематической задачи способом вариационного лучевого трассирования в тех

ситуациях, где применение упрощенного подхода с использованием вертикальных сейсмических лучей дало посредственные результаты (среды с крутопадающими границами, осложненные складками различной формы и т. п.).

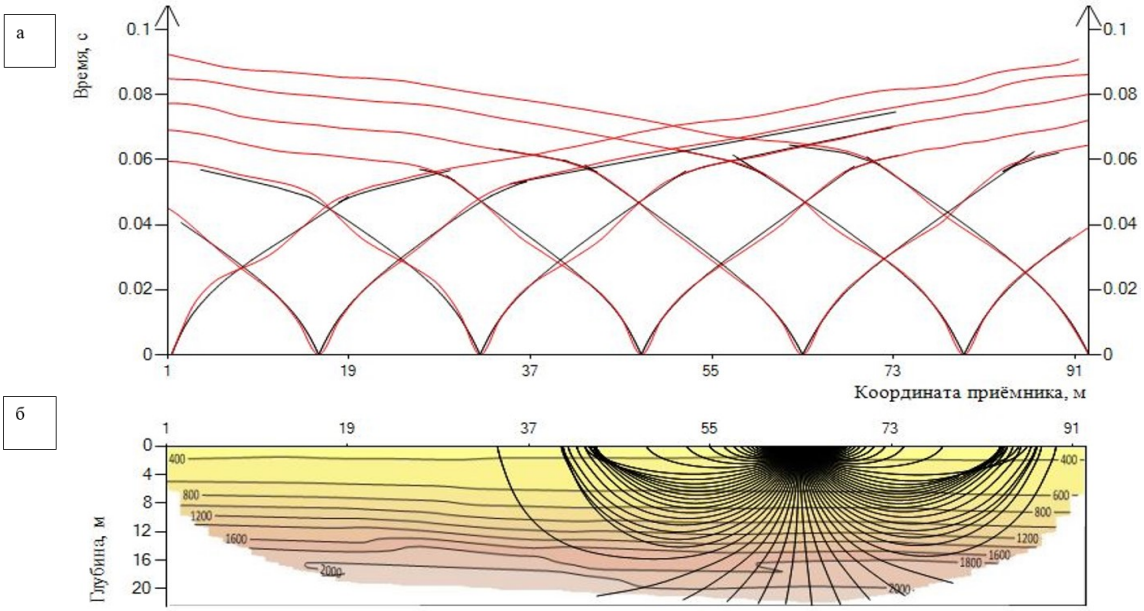


Рис. 1. Исследование точности решения обратной задачи МПВ на реальных полевых данных: *а* — сравнение синтетических (черные) и полевых (красные) годографов; *б* — восстановленный методом однородных функций скоростной разрез и лучевые траектории

Литература

1. *Галактионова А. А., Белоносов А. С.* Алгоритм решения прямой кинематической задачи сейсмики в трехмерных неоднородных изотропных средах // Математические заметки СВФУ. 2020. Т. 27. № 1. С. 53–68.
2. *Облогина Т. И.* Кинематическая теория сейсмических волн в неоднородных анизотропных средах // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 4. 1998. № 6. С. 52–59.
3. *Степанов П. Ю., Гоманюк Ю. А.* Математическое моделирование кинематики сейсмических волн в сложнопостроенных средах // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 4. 2022. № 6. С. 167–178.
4. *Гоманюк Ю. А., Степанов П. Ю., Ермаков А. П.* Исследование ограничений в области применимости метода однородных функций решения обратной кинематической задачи сейсморазведки // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 4. 2023. № 1. С. 85–96.
5. *Глоговский В. М., Лангман С. Л.* Свойства решения обратной кинематической задачи сейсморазведки // Технологии сейсморазведки. 2009. № 1. С. 10–17.
6. *Степанов П. Ю., Гоманюк Ю. А.* Алгоритмы глубинной кинематической миграции в двумерных средах // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 4. 2023. № 6. С. 114–129.

Научное издание

Труды 66-й Всероссийской научной конференции МФТИ, 1–6 апреля 2024 г.
Фундаментальная и прикладная физика

Издательство «Физматкнига»
Тел. (499) 390-51-38
www.fizmatkniga.org

Подписано в печать 30.09.2024. Формат 60×84/8. Объем 67 усл. печ. л.
Печать цифровая. Тираж 20 экз.

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