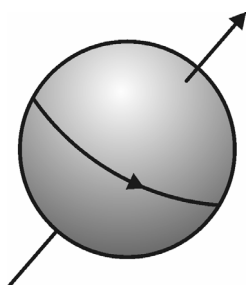




**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**





**BELARUS STATE UNIVERSITY
INSTITUTE FOR NUCLEAR PROBLEMS**

**BASIC AND APPLIED
PHYSICAL RESEARCH
2002–2009**

Collected Papers

Editor: Professor V. G. Baryshevsky

**MINSK
2009**

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ**

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

Под редакцией
профессора В. Г. Барышевского

**МИНСК
2009**

УДК 53(082)
ББК 22.3я43
Ф94

Редакционная коллегия:
доктор физико-математических наук,
профессор *В. Г. Барышевский* (отв. редактор);
кандидат физико-математических наук
С. Н. Сытова (отв. секретарь);
доктор физико-математических наук *М. В. Коржик*;
доктор физико-математических наук *А. С. Лобко*;
доктор физико-математических наук *С. А. Максименко*;
доктор физико-математических наук *В. В. Тихомиров*

Ф94 **Фундаментальные** и прикладные физические исследования. 2002–2009 гг. :
сб. науч. тр. / редкол. : В. Г. Барышевский (отв. ред.) [и др.] ; под ред. проф. В. Г. Барышевского. – Минск : БГУ, 2009. – 415 с. : ил.
ISBN 978-985-518-147-8.

В сборнике представлены результаты научных исследований, выполненных сотрудниками НИИ ЯП БГУ за 2002–2009 гг. в области ядерной и теоретической физики, прикладной физики и приборостроения.

Предназначено для научных работников, а также студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

УДК 53(082)
ББК 22.3я43

ВВЕДЕНИЕ

В сборнике трудов приведены результаты научных исследований, выполненных сотрудниками Института ядерных проблем БГУ в 2002–2009 гг. За это время получено немало значимых результатов, которые представлены в обзорных публикациях данного сборника. Здесь можно увидеть эволюцию научной тематики Института, когда некоторые направления и темы развивались и крепли, другие – снимались по различным причинам. Потеря актуальности, снижение финансирования, уход в иные развивающиеся направления науки, переход сотрудников в другие организации – все это оказывает влияние на живой процесс развития науки. Читая статьи настоящего сборника, можно проследить и вспомнить историю Института и осознать, почему произошли такие перемены. Процесс познания извилист, поэтому важно продвигаться в правильном направлении. В этом и проявляется класс, чутье и квалификация ученого. Приятно через много лет не стыдиться давних результатов, а гордо повторять известный афоризм: «Какие мы были тогда умные!». Ежегодные институтские отчеты по научной работе фиксируют результаты нашей работы. Поскольку из истории слов не выкинешь, приведем выдержки из этих отчетов с формулировкой главных научных результатов по годам, а об остальном пусть читатель составит собственное мнение.

2002 г.

Фундаментальные исследования, проводимые в НИИ ЯП БГУ, привели к созданию нового направления в области высоких технологий, не имеющего аналогов в мире. Это – создание принципиально новых генераторов электромагнитного излучения в СВЧ и оптическом диапазоне. Учеными НИИ ЯП были разработаны принципы и создан первый в мире макет объемного лазера на свободных электронах (ОЛСЭ), позволяющий обеспечить как получение большой мощности излучения, так и перестройку частоты излучения. ОЛСЭ найдут применение для нагрева термоядерной плазмы, радиолокации, передачи энергии на большие расстояния и т. д. Применение ОЛСЭ для нагрева термоядерной плазмы важно для будущих разработок, повышающих энергетическую безопасность страны.

2003 г.

Важнейшим достижением фундаментальных исследований в области физики является экспериментальное обнаружение неизвестного ранее нового физического явления – спинового дихроизма дейтронов, позволяющего проверить один из наиболее фундаментальных принципов современной картины мира – принцип причинности. Идея существования этого явления была теоретически доказана учеными Института ядерных проблем БГУ. Эксперимент был поставлен и успешно проведен учеными НИИ ЯП совместно с учеными Института ядерной физики (г. Юлих, Германия) и Института ядерной физики Кёльнского университета (Германия).

2004 г.

Показано, что первичная черная дыра, попав в нейтронную звезду, успевает полностью поглотить последнюю за время, меньше чем хаббловское. При этом в аккреционном потоке вещество нейтронной звезды будет сжато более чем в 10 раз. Показано также, что измерение доли нейтрино в возможной нейтринной вспышке при поглощении белого карлика первичной черной дырой может позволить определить тип иерархии спектра масс нейтрино.

В рамках прикладных исследований показано, что микроволновое излучение может быть использовано для повышения урожайности в сельском хозяйстве. Результаты подтверждены на практике и были отмечены дипломом и бронзовой медалью на IV Международном салоне инвестиций и инноваций за «Технологию предпосевной обработки семян зерновых и овощных культур» (М., 2004 г.).

2005 г.

Впервые экспериментально получена генерация перестраиваемого по частоте рентгеновского излучения, образуемого электронами низких энергий в кристаллах. Разработка рентгеновских источников с перестройкой частоты направлена на использование в терапии рака и маммографии.

В области биофизических технологий ведутся активные эксперименты по использованию микроволновых технологий для повышения урожайности в сельском хозяйстве. Микроволновая технология повышения урожайности овощных культур – экологически безопасная биотехнология – позволяет уничтожить семенную инфекцию, повысить энергию прорастания семян, усиливает развитие корневой системы, увеличивает фотосинтезирующий аппарат растений, способствует более быстрому развитию растений и более раннему плодоношению. В 2004–2005 посевных годах данная технология использовалась на 30 га в 8 тепличных комбинатах Беларуси. Применение данной технологии позволило получить прибавку урожая, которая составляла 60 тонн овощей (что примерно равно 60 тыс. долл.).

Для Гомельского государственного медицинского университета изготовлены два программно-аппаратных цитогенетических комплекса Хромосома-01 для изучения цитогенетического статуса различных групп населения, получившего дополнительные дозы облучения в результате катастрофы на ЧАЭС, в том числе у больных раком щитовидной железы.

2006 г.

Разработан эффективный метод отклонения быстрых заряженных частиц изогнутыми кристаллами, предназначенный для исследования возможностей очистки гало пучка Большого адронного коллайдера на стадии запланированной его модернизации с целью повышения светимости.

Впервые предложен метод создания мономолекулярного источника когерентного излучения в терагерцовом диапазоне длин волн (мономолекулярной лампы бегущей волны, нанолазера на свободных электронах) на основе черенковского и осцилляторного механизмов развития излучательной неустойчивости. Создание таких источников позволит использовать их в качестве базовых

элементов нанoeлектроники, а также позволит вводить излучение локально в изучаемые или обрабатываемые микро- и нанообъекты.

Впервые в стране создан и успешно испытан макет магнитокумулятивного генератора токов и напряжений для создания сверхсильных магнитных полей.

2007 г.

Обоснована возможность объемного отражения частиц высоких энергий несколькими кристаллическими плоскостями одного кристалла в условиях движения под малым углом к кристаллической оси.

Показано, что вклад Т-, Р-нечетных ядерных сил в поворот спина нейтронов, дифрагирующих в нецентросимметричном кристалле, возможно наблюдать в области резонанса лантана ^{139}La .

Предложена модель темной энергии, основанная на вакуумных флуктуациях скалярного поля.

2008 г.

Создана теория поглощения белых карликов шестимерными первичными черными дырами, которая позволила показать, что факт существования белых карликов свидетельствует о безопасности экспериментов по рождению шестимерных черных дыр, готовящихся на Большом адронном коллайдере в ЦЕРНе.

По договору с Национальным институтом геофизики и вулканологии (Италия) создан подводный гамма-спектрометр К-40 для крупнейшего международного проекта KM3Net – создания в Средиземном море системы подводных детекторов для поиска и исследования космических нейтрино.

Редакционная коллегия

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЕ И СПИНОВЫЙ ДИХРОИЗМ ДЕЙТРОНОВ В НУКЛОННОЙ МИШЕНИ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ 5–20 МэВ

В. Г. Барышевский, А. А. Ровба

При прохождении дейтронов через неполяризованное вещество возникают двулучепреломление (вращение плоскости поляризации дейтронного пучка) и спиновый дихроизм дейтронов (появление тензорной поляризации у неполяризованного пучка). Приводится теоретическое описание и оценка этих эффектов при низких энергиях в нуклонной мишени на основе представления дейтрона в виде двух рассеивающих центров, влияющих друг на друга. При рассмотрении учитывается только S-рассеяние для сильного взаимодействия.

1. Введение

Долгое время считалось, что явления двулучепреломления (вращения плоскости поляризации) и дихроизма присущи только фотонам. Однако открытие явления прецессии спина нейтрона в поляризованной мишени, обусловленного ядерным псевдомагнитным полем [1–4], и дальнейший анализ показал, что аналогии этих эффектов имеют место не только для фотонов, но и для других частиц [5, 6]. По этой причине эффекты, обусловленные оптической анизотропией вещества, рассматриваемые в оптике, в действительности представляют собой частный случай когерентных явлений, возникающих при прохождении поляризованных частиц через вещество.

Исследование спин-зависимых взаимодействий элементарных частиц при высоких энергиях является важной частью научно-исследовательских программ, подготовленных для проведения на накопительных кольцах (COSY, CERN, RHIC). Изучение многих явлений в физике элементарных частиц требует знание мнимой и реальной части амплитуды рассеяния на нулевой угол. Если мнимую часть согласно оптической теореме можно найти через полное сечение рассеяния, то реальную часть приходится получать через дисперсионные уравнения или используя экстраполяцию результатов рассеяния на малый угол. Таким образом, особый интерес представляют явления двойного лучепреломления и спинового дихроизма дейтронов [5, 6], пролетающих через однородное изотропное вещество. Эти явления позволяют напрямую изучать реальную и мнимую часть спин-зависимой амплитуды рассеяния, что дает возможность проверить сами дисперсионные уравнения на основе независимых измерений мнимой и реальной части. Подтверждение существования этого эффекта приведет к необходимости его учета во всех экспериментах по рассеянию частиц со спином больше,

чем 1/2 на поляризованных и неполяризованных мишенях, его вклада в накопительных кольцах [7] и учета во всех прецизионных экспериментах, таких, например, как измерение электрического дипольного момента дейтрона.

Согласно [5, 6], в результате прохождения поляризованного дейтронного пучка через неполяризованную мишень плоскость поляризации поворачивается на угол

$$\phi = \frac{2\pi\rho}{k_d} \Re(f(E,0)_{\pm 1} - f(E,0)_0)L, \quad (1)$$

где ρ – число рассеивателей в единице объема, E – энергия дейтрона, $k_d = \frac{\sqrt{2m_d E}}{\hbar}$ – модуль волнового вектора дейтрона, m_d – масса дейтрона, L – толщина мишени, $f(E,0)_{\pm 1}$ и $f(E,0)_0$ – амплитуды рассеяния на угол 0 для дейтронов с проекцией полного момента ± 1 и 0 на волновой вектор дейтрона соответственно.

При прохождении неполяризованных дейтронов через неполяризованную мишень возникает также спиновый дихроизм дейтронов, т. е. появляется тензорная поляризация у дейтронов, описываемая параметром

$$A = -\frac{3}{4}P_{zz} = \frac{\rho}{2}(\sigma(E)_{\pm 1} - \sigma(E)_0)L, \quad (2)$$

где P_{zz} – тензорная поляризация, $\sigma(E)_{\pm 1}$ и $\sigma(E)_0$ – полные сечения рассеяния для дейтронов с проекцией полного момента ± 1 и 0 на волновой вектор дейтрона соответственно.

В области низких энергий, вследствие ионизационных потерь, дейтроны достаточно быстро теряют энергию. В результате в этом случае мы должны учесть в (1), (2) зависимость E от пути z , пройденном дейтронами в веществе. Как следствие, для ϕ и A имеем следующие выражения:

$$\phi = \int_0^L \frac{2\pi\rho}{k_d(z)} \Re(f(E(z),0)_{\pm 1} - f(E(z),0)_0) dz, \quad (3)$$

$$A = \int_0^L \frac{\rho}{2} (\sigma(E(z))_{\pm 1} - \sigma(E(z))_0) dz. \quad (4)$$

Первые экспериментальные исследования спинового дихроизма дейтронов были проведены в 2003 и 2006 гг. на базе электростатического ускорителя дейтронов Института ядерной физики Кёльнского университета с участием следующих ученых: R. Engels, F. Rathmann, H. Seyfarth, H. Stroehrer, T. Ullrich – COSY (г. Юлих, Германия); C. Dueweke, R. Emmerich, A. Imig, J. Ley, H. Paetz g. Schieck, R. Schultze, G. Tenckhoff, C. Weske – ИЯФ Кёльнского университета (Германия); А. Васильев, К. Григорьев, М. Микиртычянц – ПИЯФ (г. Гатчина, Россия). В эксперименте использовался неполяризованный дейтронный пучок с

начальной энергией до 18 МэВ и несколько толстых неполяризованных аморфных углеродных мишеней. В эксперименте измерялась зависимость приобретенной тензорной поляризации (спинового дихроизма) дейтронного пучка от его энергии после мишени (ниже первоначальной энергии из-за ионизационных потерь) [8, 9]. Экспериментальная зависимость тензорной поляризации от энергии показана на рис. 1.

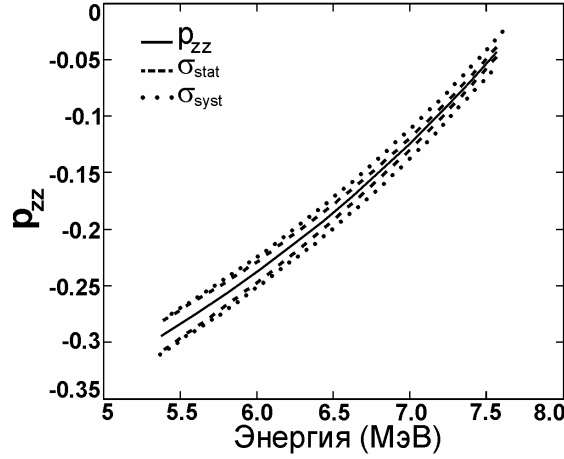


Рис. 1. Экспериментальная зависимость тензорной поляризации от энергии, полученная для углеродной мишени толщиной 129.5 мг/см^2

Как видно из рис. 1, первые экспериментальные данные указывают на то, что спиновый дихроизм может достигать большой величины и сильно зависит от энергии. Теоретическое описание этого эффекта в этой области энергий для углеродной мишени осложняется наличием дополнительных фаз рассеяния, помимо фазы S-рассеяния, влиянием кулоновского взаимодействия, наличием неупругих процессов. Однако эти факторы менее существенны при описании спинowego дихроизма и двулучепреломления дейтронов в нуклонной мишени, при этом получают качественные и количественные представления о величине этих эффектов. В данной работе исследуется амплитуда рассеяния на угол ноль $f(0)$ в области низких энергий, где основную роль играет S-рассеяние. Получена оценка величины эффектов в этой области энергий в случае прохождения дейтронов через водородную мишень.

2. Волновая функция дейтрона

Рассмотрим подробнее волновую функцию дейтрона в основном состоянии. Известно, что основное состояние дейтрона описывается суперпозицией сферически симметричной волновой функцией S-состояния и волновой функцией D-состояния [10]:

$$\Psi = \Psi_S + \Psi_D$$

Согласно [10], функции Ψ_S и Ψ_D можно представить в виде

$$\Psi_S = \frac{u(r)}{r} \Omega_{011M} \xi_d, \Psi_D = \frac{w(r)}{r} \Omega_{211M} \xi_d,$$

где $u(r)$ и $w(r)$ – радиальные функции S- и D-состояний, ξ_d – изоспиновая функция дейтрона, волновая функция Ω_{lSJM} описывает состояние системы с полным моментом J и проекцией момента M и выражается через собственные функции орбитального и спинного моментов Y_{lm} и $\chi_{S\mu}$ [10]:

$$\Omega_{lSJM} = \sum_{m+\mu=M} \langle lmS\mu | JM \rangle Y_{lm} \chi_{S\mu},$$

где l и S – квантовые числа квадратов орбитального и спинного моментов, m и μ – их проекции, $\langle lmS\mu | JM \rangle$ – коэффициент Клебша – Гордона.

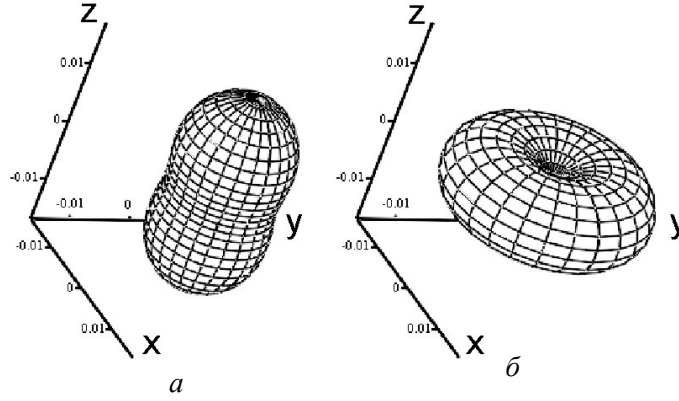


Рис. 2. Квадрат модуля волновой функции дейтрона на расстоянии 2 ферми от центра масс с проекцией полного момента: $a - M = \pm 1$; $b - M = 0$ соответственно

Напомним, что полный момент дейтрона $J=1$, как следствие, Ω_{011M} , Ω_{211M} имеют вид

$$\Omega_{011M} = Y_{00} \chi_{1M},$$

$$\Omega_{211M} = \sqrt{\frac{(3+M)(2+M)}{4 \cdot 5}} Y_{2M+1} \chi_{1-1} - \sqrt{\frac{(2-M)(2+M)}{2 \cdot 5}} Y_{2M} \chi_{10} + \sqrt{\frac{(2-M)(3-M)}{4 \cdot 5}} Y_{2M-1} \chi_{11}.$$

В результате волновую функцию дейтрона с проекцией полного момента $M = \pm 1, 0$ можно записать следующим образом:

$$\Psi_{\pm 1} = \left(\frac{u(r)}{r} Y_{00} + \sqrt{\frac{1}{10}} \frac{w(r)}{r} Y_{20} \right) \chi_{11} \xi_d + \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{w(r)}{r} Y_{22} \chi_{1-1} \xi_d + \left(-\sqrt{\frac{3}{10}} \right) \frac{w(r)}{r} Y_{21} \chi_{10} \xi_d =$$

$$= \alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d + \beta_{\pm 1} \chi_{1-1} \xi_d + \gamma_{\pm 1} \chi_{10} \xi_d,$$

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= \sqrt{\frac{3}{10}} \frac{w(r)}{r} Y_{2-1} \chi_{11} \xi_d + \sqrt{\frac{3}{10}} \frac{w(r)}{r} Y_{21} \chi_{1-1} \xi_d + \left(\frac{u(r)}{r} Y_{00} - \sqrt{\frac{2}{5}} \frac{w(r)}{r} Y_{20} \right) \chi_{10} \xi_d = \\ &= \alpha_0 \chi_{11} \xi_d + \beta_0 \chi_{1-1} \xi_d + \gamma_0 \chi_{10} \xi_d.\end{aligned}$$

Известно, что радиус дейтрона больше радиуса действия ядерных сил и, как следствие, для радиальных функций дейтрона можно использовать следующие выражения [10]:

$$u = C_1 e^{-\alpha r}, \quad \omega = C_2 \left(1 + \frac{3}{\alpha r} + \frac{3}{(\alpha r)^2} \right) e^{-\alpha r}, \quad (5)$$

где $\alpha = \frac{\sqrt{2\mu\varepsilon}}{\hbar}$, а C_1 и C_2 – нормировочные коэффициенты, μ – приведенная масса двух нуклонов. Нормировочные коэффициенты можно найти из условия, что вес D-состояния составляет $\approx 7\%$. На рис. 2 показаны квадраты модулей волновых функций дейтрона на расстоянии 2 ферми от центра масс с различными проекциями полного момента.

3. Рассеяние дейтрона на нуклоне

Рассмотрим теперь рассеяние дейтронов с энергий 5–20 МэВ на нуклоне. Для нахождения амплитуды рассеяния на угол 0 можно перейти в систему отсчета, связанную с дейтроном, рассмотреть рассеяние нуклона на двух неподвижных и несвязанных рассеивателях (энергия нуклона превосходит энергию связи дейтрона $\varepsilon = 2.226$ МэВ), а затем результат усреднить по спиновой волновой функции протона и волновой функции основного состояния дейтрона.

Рассмотрим рассеяние нуклона с импульсом $\vec{p}$ на дейтроне, как рассеяние волны с волновым вектором $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ на двух центрах (рис. 3).

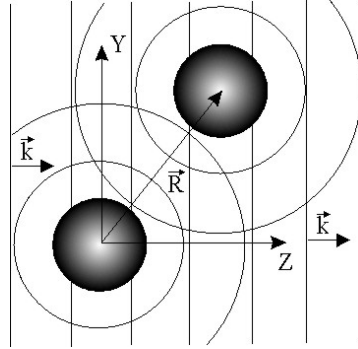


Рис. 3. Рассеяние волны на двух центрах

Если учесть, что, кроме первичной плоской волны на рассеиватель, расположенный в начале координат, падает волна, рассеянная на втором центре, то эффективная амплитуда рассеяния на первом центре $\hat{A}_1$ отличается от амплитуды рассеяния на этом же центре в отсутствии второго центра $\hat{a}_1$ [11, 12]. Аналогичные рассуждения справедливы для амплитуд $\hat{A}_2$ и $\hat{a}_2$ для второго рассеивателя. Согласно [11], амплитуду рассеяния на угол нуль на системе из двух частиц можно записать в виде

$$\hat{A} = \hat{A}_1 + \hat{A}_2 e^{-ik\vec{R}},$$

где $\hat{A}_1 = \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{A}_2 \frac{e^{ikR}}{R}$, $\hat{A}_2 = \hat{a}_2 e^{ik\vec{R}} + \hat{a}_2 \hat{A}_1 \frac{e^{ikR}}{R}$. Для нахождения амплитуды рассеяния протона на дейтроне A необходимо найти матричные элементы $\hat{A}$, т. е. необходимо усреднить $\hat{A}$ по спиновой волновой функции протона $\Psi_p = \chi_p \xi_p$ (χ_p и ξ_p – спиновая и изоспиновая функция протона соответственно) и волновой функции основного состояния дейтрона:

$$A = \int \langle \Psi \Psi_p | \hat{A} | \Psi \Psi_p \rangle d^3 \vec{R} = \int \left(\langle \Psi \Psi_p | \hat{A}_1 | \Psi \Psi_p \rangle + \langle \Psi \Psi_p | \hat{A}_2 | \Psi \Psi_p \rangle e^{-ik\vec{R}} \right) d^3 \vec{R}, \quad (6)$$

где

$$\begin{cases} \langle \Psi \Psi_p | \hat{A}_1 | \Psi \Psi_p \rangle = \langle \Psi \Psi_p | \hat{a}_1 | \Psi \Psi_p \rangle + \langle \Psi \Psi_p | \hat{a}_1 \hat{A}_2 | \Psi \Psi_p \rangle \frac{e^{ikR}}{R}, \\ \langle \Psi \Psi_p | \hat{A}_2 | \Psi \Psi_p \rangle = \langle \Psi \Psi_p | \hat{a}_2 | \Psi \Psi_p \rangle e^{ik\vec{R}} + \langle \Psi \Psi_p | \hat{a}_2 \hat{A}_1 | \Psi \Psi_p \rangle \frac{e^{ikR}}{R}. \end{cases} \quad (7)$$

Рассмотрим рассеяние протона на дейтроне в состоянии $M = \pm 1$ без изменения спиновых и изоспиновых состояний в процессе перерассеяния и в конечном состоянии. В этом случае для матричного элемента $\hat{A}_1$ получим

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\pm 1} \Psi_p | \hat{A}_1 | \Psi_{\pm 1} \Psi_p \rangle &= \langle \alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A}_1 | \alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle + \\ &+ \langle \beta_{\pm 1} \chi_{1-1} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A}_1 | \beta_{\pm 1} \chi_{1-1} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle + \langle \gamma_{\pm 1} \chi_{10} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A}_1 | \gamma_{\pm 1} \chi_{10} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогичные преобразования справедливы и для $\hat{A}_2$. С учетом (6) и (8) амплитуда рассеяния протона на дейтроне в состоянии с $M = \pm 1$ равна

$$\begin{aligned} A_{\pm 1} &= \int \langle \Psi_{\pm 1} \Psi_p | \hat{A} | \Psi_{\pm 1} \Psi_p \rangle d^3 \vec{R} = \int \left(\langle \Psi_{\pm 1} \Psi_p | \hat{A}_1 | \Psi_{\pm 1} \Psi_p \rangle + \langle \Psi_{\pm 1} \Psi_p | \hat{A}_2 | \Psi_{\pm 1} \Psi_p \rangle e^{-ik\vec{R}} \right) d^3 \vec{R} = \\ &= \int \langle \alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A} | \alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle d^3 \vec{R} + \int \langle \beta_{\pm 1} \chi_{1-1} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A} | \beta_{\pm 1} \chi_{1-1} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle d^3 \vec{R} + \\ &+ \int \langle \gamma_{\pm 1} \chi_{10} \xi_d \chi_p \xi_p | \hat{A} | \gamma_{\pm 1} \chi_{10} \xi_d \chi_p \xi_p \rangle d^3 \vec{R}. \end{aligned} \quad (9)$$

Рассмотрим первое слагаемое этой суперпозиции (для остальных рассуждения будут аналогичны). Для упрощения обозначим вектор состояния $|\alpha_{\pm 1} \chi_{11} \xi_d \chi_p \xi_p\rangle$ через $|\varphi_{\alpha_{\pm 1}}\rangle$. Используя (6) и (7), получим

$$\int \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle d^3 \vec{R} = \int (\langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle e^{-ik\vec{R}}) d^3 \vec{R}, \quad (10)$$

где

$$\begin{cases} \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R}, \\ \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle e^{ik\vec{R}} + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R}. \end{cases} \quad (11)$$

Воспользуемся теперь тем, что, как показывает анализ, вклад процессов с переворотом спина с амплитудой a_f в общую амплитуду в a_f/R раз меньше, чем вклад от рассеяния без переворота спина. Это позволяет записать (11) в виде

$$\begin{cases} \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R}, \\ \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle e^{ik\vec{R}} + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R}. \end{cases} \quad (12)$$

Решая полученную систему уравнений, получим:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle &= \frac{\langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R} e^{ik\vec{R}}}{1 - \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{2ikR}}{R^2}}, \\ \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle &= \frac{\langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle e^{ik\vec{R}} + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R}}{1 - \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{2ikR}}{R^2}}, \\ \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle &= \int \frac{\langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + 2 \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{ikR}}{R} \cos(k\vec{R})}{1 - \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{a}_1 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A}_2 | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle \frac{e^{2ikR}}{R^2}} d^3 \vec{R}. \end{aligned} \quad (13)$$

Проделав аналогичные действия (10) – (13) для остальных слагаемых (9), получим

$$A_{\pm 1} = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\beta_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\beta_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\gamma_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\gamma_{\pm 1}} \rangle. \quad (14)$$

Амплитуду рассеяния протона на дейтроне в состоянии с $M = 0$ можно получить аналогично:

$$A_{\pm 1} = \langle \varphi_{\alpha_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\alpha_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\beta_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\beta_{\pm 1}} \rangle + \langle \varphi_{\gamma_{\pm 1}} | \hat{A} | \varphi_{\gamma_{\pm 1}} \rangle. \quad (15)$$

Таким образом, амплитуда рассеяния дейтрона на протоне (с учетом обратного преобразования системы координат в нерелятивистском случае) записывается в виде

$$F(E, 0)_{\pm 1} = A_{\pm 1} \frac{m_d}{m}, \quad F(E, 0)_0 = A_0 \frac{m_d}{m}. \quad (16)$$

4. Двулучепреломление и спиновый дихроизм дейтронов в нуклонной мишени в области энергий 5–20 МэВ

Для определения величины амплитуды рассеяния дейтронов на нуклоне необходимо знать амплитуду рассеяния нуклона на нуклоне. Будем рассматривать взаимодействие между нуклонами без учета кулоновского взаимодействия. Предположим, что $\hat{a}_1$ описывает рассеяние протона на протоне, а $\hat{a}_2$ – протона на нейтроне. В связи с тем, что энергия нуклона составляет порядка 10 МэВ, то длина волны нуклона превосходит радиус действия ядерных сил. В этом случае основной вклад в рассеяние дает волна с орбитальным моментом, равным нулю (S-рассеяние). Тогда амплитуды нуклон-нуклонного взаимодействия можно записать в виде [10]:

$$\begin{aligned}\hat{a}_1 &= a + b(\vec{\sigma}_p \vec{\sigma}_{p'}) + c(\vec{\tau}_p \vec{\tau}_{p'}) + d(\vec{\sigma}_p \vec{\sigma}_{p'})(\vec{\tau}_p \vec{\tau}_{p'}), \\ \hat{a}_2 &= a + b(\vec{\sigma}_p \vec{\sigma}_{n'}) + c(\vec{\tau}_p \vec{\tau}_{n'}) + d(\vec{\sigma}_p \vec{\sigma}_{n'}) (\vec{\tau}_p \vec{\tau}_{n'}),\end{aligned}\quad (17)$$

где индексы p' и n' относятся к протону и нейтрону, входящих в состав дейтрона, $\vec{\sigma}$ и $\vec{\tau}$ – спиновая и изоспиновая матрица Паули, а коэффициенты a , b , c и d находятся из анализа триплетного a_t и синглетного a_s S-рассеяния протона на нейтроне с полным изотопическим спином системы $T=1$ и $T=0$ и равны

$$a = \frac{3a_t + 3a_s}{8}, \quad b = \frac{a_t - 3a_s}{8}, \quad c = -\frac{3a_t - a_s}{8}, \quad d = -\frac{a_t + a_s}{8}. \quad (18)$$

Найдем амплитуду рассеяния в триплетном и синглетном состоянии в явном виде. Амплитуда рассеяния в системе центра масс двух нуклонов записывается в виде

$$f_t = \frac{1}{k_\mu} e^{i\delta_t} \sin \delta_t, \quad f_s = \frac{1}{k_\mu} e^{i\delta_s} \sin \delta_s, \quad (19)$$

где $k_\mu = \frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\frac{2E}{m_d}}$ модуль волнового вектора относительного движения двух нуклонов в системе центра масс двух нуклонов, μ – приведенная масса двух нуклонов, δ_t и δ_s – фазы триплетного и синглетного S-рассеяния. В системе координат, связанной с дейтроном, амплитуда рассеяния записывается как

$$a_{t(s)} = \frac{m}{\mu} f_{t(s)}. \quad (20)$$

Согласно [10], для триплетного и синглетного состояния фазы рассеяния ε_t и ε_s соответственно могут быть записаны в виде

$$\delta_t = \arccctg\left(-\frac{\alpha_t}{k_\mu}\right), \quad \delta_s = \arccctg\left(-\frac{\alpha_s}{k_\mu}\right), \quad (21)$$

где $\alpha_t = \frac{\sqrt{2\mu\varepsilon_t}}{\hbar}$, $\alpha_s = -\frac{\sqrt{2\mu\varepsilon_s}}{\hbar}$, $\varepsilon_t = \varepsilon = 2.226$ МэВ – энергия связи триплетного состояния, $\varepsilon_s = 0.072$ – виртуальная энергия связи синглетного состояния.

Подставляя (18) – (21) в (17), а (17) в (13) – (16), получим амплитуду рассеяния дейтронов на поляризованных протонах. Для нахождения амплитуды рассеяния дейтронов в состоянии с $M = \pm 1, 0$ на неполяризованных протонах необходимо (16) усреднить по спиновым состояниям протонов:

$$\begin{aligned} f(E, 0)_{\pm 1} &= \frac{F(E, 0, \chi_p(1/2))_{\pm 1} + F(E, 0, \chi_p(-1/2))_{\pm 1}}{2}, \\ f(E, 0)_0 &= \frac{F(E, 0, \chi_p(1/2))_0 + F(E, 0, \chi_p(-1/2))_0}{2}. \end{aligned} \quad (22)$$

С помощью оптической теоремы можно найти полные сечения рассеяния:

$$\sigma(E)_{\pm 1, 0} = \frac{4\pi}{k_d} \text{Im}(f(E, 0)_{\pm 1, 0}). \quad (23)$$

Для оценки величины поворота плоскости поляризации и спинового дихроизма, а также их зависимости от энергии, рассмотрим прохождение дейтронов с энергией 20–21.2 МэВ через водородную мишень толщиной 0.1 г/см^2 . С учетом того что такая мишень является толстой для этих энергий, вследствие ионизационных потерь, первоначальная энергия дейтронов после прохождения мишени упадет до 4.5–7.8 МэВ. Подставляя (22) в (3), а (23) в (4) и учитывая ионизационные потери, можно получить зависимости величины эффектов от энергии дейтронов, прошедших через мишень (рис. 4).

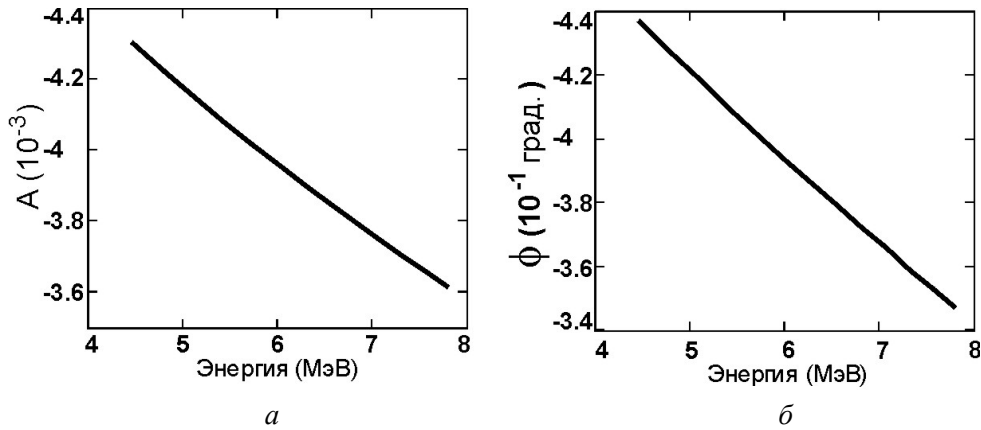


Рис. 4. Зависимость (а) дихроизма и (б) угла поворота плоскости поляризации ϕ от энергии дейтронов после мишени

Из рисунка 4 видно, что в случае прохождения неполяризованных дейтронов с начальной энергией 20.5 МэВ через неполяризованную водородную мишень толщиной 0.1 г/см^2 энергия дейтронов после мишени падает до 6 МэВ, при

этом значение спинового дихроизма составляет порядка $4 \cdot 10^{-3}$. В случае же прохождения поляризованных дейтронов угол поворота плоскости поляризации составляет порядка -0.4° . Таким образом, оценки подтверждают, что эти эффекты можно наблюдать в эксперименте, но для компенсации ионизационных потерь, увеличения эффектов, получения более точной зависимости эффектов от энергии дейтронов предпочтительней использовать накопительные кольца с внутренней газовой мишенью.

Литература

1. *Baryshevsky V., Podgoretsky M.* // Zh. Eksp. Theor. Fiz. 1964. Vol. 47. P. 1050.
2. *Abragam A. et al.* // C. R. Acad. Sci. 1972. Vol. 247. P. 423.
3. *Forte M.* // Nuovo Cimento. 1973. Vol. A 18. P. 727.
4. *Abragam A., Goldman M.* Nuclear Magnetism: order and disorder. 1982.
5. *Baryshevsky V. G.* // Phys. Lett. 1992. Vol. A171. P. 431.
6. *Baryshevsky V. G.* // J. Phys. 1993. Vol. G19. P. 273.
7. *Baryshevsky V., Rathmann F.* // COSY summer school. 2002. Vol. 1. P. 165.
8. *Baryshevsky V. G., Duweke C., Emmerich R. et al.* // arXiv: hep-ex/0501045
9. *Baryshevsky V. G., Duweke C. et al.* // Proc. 17th Int. Spin Physics SPIN2006, Kyoto, Japan. 2007. Vol. 915. P. 777.
10. *Ситенко А. Г., Тартаковский В. К.* Лекции по теории ядра. 1972.
11. *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. 1967. С. 669.
12. *Барышевский В. Г.* Ядерная оптика поляризованных сред. 1995. С. 25.

BIREFRINGENCE AND SPIN DICHROISM FOR DEUTERONS WITH ENERGY 5–20 MeV IN NUCLEON TARGET

V. G. Baryshevsky, A. A. Rouba

Passing of deuteron beam through unpolarized matter, as find out, is accompanying by phenomena of birefringence (rotation of polarization plane of initially polarized beam) and deuteron spin dichroism (appearance of tensor polarization of initially unpolarized beam). Consideration and estimation of these phenomenon at low energy in the nucleon target on the base of representation of deuteron as two scattering centers, affecting one another was carried out. S-scattering for strong interaction was taken into account.

The obtained results confirm that birefringence and deuteron spin dichroism can be observed experimentally. For compensating of energy loose and increasing effects a storage ring and an internal gas target can be used.

ОСЦИЛЛЯЦИИ СПИНА И СПИНОВЫЙ ДИХРОИЗМ ДЕЙТРОНОВ, ВРАЩАЮЩИХСЯ В НАКОПИТЕЛЬНОМ КОЛЬЦЕ

В. Г. Барышевский, А. Р. Ширвель

В работах [1, 2] было показано, что при движении в однородном изотропном веществе частиц больших энергий, обладающих спином $S \geq 1$, возникают явления вращения их спина и спинового дихроизма (эффект двойного лучепреломления). В настоящее время спиновый дихроизм обнаружен экспериментально для дейтронов с энергией $10 \div 20$ МэВ [3]. Исследование эффекта двулучепреломления позволяет измерить зависящую от спина часть амплитуды упругого когерентного рассеяния вперед дейтрона на протоне (ядре) даже в области высоких и сверхвысоких энергий. Изучение данного эффекта важно также вследствие того, что он обязательно присутствует при исследовании процессов взаимодействия поляризованных дейтронов с ядрами, и игнорирование его может привести к неправильной интерпретации экспериментальных данных [4]. В этой связи необходимо обратить внимание на эксперименты, направленные на поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) дейтронов, вращающихся в накопительном кольце. При подготовке указанных экспериментов для описания эволюции спина частиц в накопителе используется уравнение Баргмана – Мишеля – Телегди [5, 6], однако оно не содержит в себе эффекта двойного лучепреломления.

В настоящей работе проводится рассмотрение явлений осцилляций спина и спинового дихроизма дейтронов в веществе и в электрическом поле при их движении в накопителе. Получены уравнения, описывающие эволюцию состояния поляризации пучка дейтронов с учетом вкладов указанных явлений. Показано, что эффект двулучепреломления приводит к значительным частотам прецессии спина и, следовательно, должен быть детально изучен при проведении в накопителях экспериментов по поиску ЭДМ дейтрона.

Рассмотрим движение дейтрона в накопителе. Для описания эволюции спина релятивистской частицы, движущейся во внешних магнитном и электрическом полях, широко используется уравнение Баргмана – Мишеля – Телегди (БМТ) [5, 6]. Так, согласно [7, 8], БМТ уравнение с учетом вклада ЭДМ может быть записано в виде

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = [\vec{p} \times \vec{\Omega}(d)], \quad (1)$$

где t – время в лабораторной системе координат,

$$\vec{\Omega}(d) = \frac{e}{m} \left[\left(a + \frac{1}{\gamma} \right) \vec{B} - a \frac{\gamma}{\gamma+1} (\vec{\beta} \cdot \vec{B}) \vec{\beta} - \left(\frac{g}{2} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \right) \frac{\vec{\beta} \times \vec{E}}{c} \right] + \frac{d}{\hbar} (\vec{E} + c \vec{\beta} \times \vec{B}),$$

m – масса частицы, e – ее заряд, $\vec{p}$ – вектор спиновой поляризации, d – электрический дипольный момент, γ – Лоренц-фактор, $\vec{\beta} = \vec{v}/c$, $a = (g-2)/2$, g –

гиромагнитное отношение, $\vec{E}$ и $\vec{B}$ – напряженности электрического и магнитного полей в точке нахождения частицы.

Согласно [1, 2], проходящая через неполяризованное вещество частица со спином $S \geq 1$ характеризуется показателем преломления, зависящим от ориентации ее спина относительно импульса. Другими словами, при движении в среде частица обладает зависящей от ее спинового состояния эффективной потенциальной энергией [1, 2]:

$$\hat{V} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m\gamma} N \hat{f}(0), \quad (2)$$

где $\hat{f}(0)$ – зависящая от спина амплитуда упругого когерентного рассеяния частицы на нулевой угол, N – плотность рассеивателей вещества (число рассеивателей в 1 см^3). Подставляя явную форму $\hat{f}(0)$ для частицы со спином $S=1$ (дейтрон) ($\hat{f}(0) = d + d_1(\vec{S}\vec{n})^2$) в (2), можно получить [1, 2]

$$\hat{V} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m\gamma} N \left(d + d_1(\vec{S}\vec{n})^2 \right), \quad (3)$$

где $\vec{n}$ – единичный вектор вдоль направления импульса частицы.

Сравним энергию взаимодействия (3) с энергией дейтрона $\hat{V}_E$ во внешнем электрическом поле, обусловленной наличием у частицы тензора электрической поляризуемости:

$$\hat{V}_E = \alpha_S \vec{E}^2 - \alpha_T \vec{E}^2 (\vec{S}\vec{n}_E)^2, \quad (4)$$

где α_S , α_T – скалярная и тензорная электрические поляризуемости дейтрона соответственно, $\vec{n}_E$ – единичный вектор вдоль $\vec{E}$. Как видим, энергия взаимодействия дейтрона с веществом имеет вид, совпадающий с энергией дейтрона в электрическом поле. Как следствие, и расщепление энергетических уровней данной ядерной системы в веществе подобно расщеплению энергетических уровней атома (ядра), находящегося во внешнем электрическом поле (квадратичный эффект Штарка). Следовательно, (3) может рассматриваться как энергия взаимодействия дейтрона с псевдоэлектрическим ядерным полем вещества.

Таким образом, при рассмотрении эволюции спина частицы с $S=1$ в накопителе необходимо иметь в виду несколько взаимодействий: 1) взаимодействия магнитного и электрического дипольного моментов с электромагнитным полем; 2) взаимодействие частицы с псевдоэлектрическим ядерным полем вещества; 3) взаимодействие частицы с электрическим полем вследствие наличия у нее тензора электрической поляризуемости (заметим, что дейтрон обладает и магнитной поляризуемостью [9], однако в данной работе мы сосредоточим внимание на описании влияния псевдоэлектрического и электрического полей на спин частицы).

Следует обратить внимание на то, что потенциал (3), обусловленный когерентным взаимодействием частицы с веществом, имеет реальную и мнимую части, описывающие когерентные упругие и неупругие процессы. По этой при-

чине вклад данного взаимодействия в эволюцию спина дейтрона в накопителе более последовательно рассматривать на языке матрицы плотности.

Матрица плотности системы «дейтрон + мишень»

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_d \otimes \hat{\rho}_t,$$

где $\hat{\rho}_t$ – матрица плотности рассеивателей мишени, $\hat{\rho}_d$ – матрица плотности пучка дейтронов:

$$\hat{\rho}_d = I(\vec{k}) \left(\frac{1}{3} \hat{1} + \frac{1}{2} \vec{p}(\vec{k}) \hat{S} + \frac{1}{9} p_{ik}(\vec{k}) \hat{Q}_{ik} \right), \quad (5)$$

где $I(\vec{k})$ – интенсивность пучка, $\vec{p}$ – его вектор поляризации, p_{ik} – компоненты тензора квадрупольной поляризации. Для неполяризованной мишени $\hat{\rho}_t$ пропорциональна единичной матрице в спиновом пространстве ядер мишени.

Уравнение для матрицы плотности дейтронного пучка можно записать в виде

$$\frac{d\hat{\rho}_d}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_d] + \left(\frac{\partial \hat{\rho}_d}{\partial t} \right)_{col}, \quad (6)$$

гамильтониан $\hat{H}$ описывает взаимодействие дейтрона с внешним электромагнитным полем вследствие наличия у него магнитного и электрического дипольного моментов, а также электрической и магнитной поляризуемостей (далее будем рассматривать влияние на поведение спина дейтрона электрического поля за счет тензора электрической поляризуемости ядра (4)). В этом случае $\hat{H}$ имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_d + \hat{V}_E$ (считаем, что поля $\vec{E}$ и $\vec{B}$ направлены ортогонально скорости частицы), гамильтониан $\hat{H}_0$ приводит к уравнению Баргмана – Мишеля – Телегди:

$$\begin{aligned} \hat{V}_d &= -d(\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B}) \hat{S}, \\ \hat{V}_E &= \alpha_s (\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B})^2 - \alpha_T (\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B})^2 (\hat{S} \vec{n}_E)^2, \\ \vec{n}_E &= \frac{\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B}}{|\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B}|}. \end{aligned}$$

Столкновительный член $\left(\frac{\partial \hat{\rho}_d}{\partial t} \right)_{col}$ может быть найден методом, описанным в [10]:

$$\left(\frac{d\hat{\rho}_d}{dt} \right)_{col} = vN Sp_t \left[\frac{2\pi i}{k} \left[\hat{F}(\theta=0) \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{F}^+(\theta=0) \right] + \int d\Omega \hat{F}(\vec{k}') \hat{\rho}(\vec{k}') \hat{F}^+(\vec{k}') \right], \quad (7)$$

где $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$, $\vec{q}$ – импульс, переданный ядрам мишени, v – модуль начальной скорости дейтронов в пучке, N – число ядер мишени в единице объема, $\hat{F}$ – зависящая от спинов амплитуда рассеяния дейтрона на ядре мишени. Первое слагаемое в (7) описывает когерентное рассеяние, второе – многократное рассеяние в мишени.

С учетом явного вида амплитуды рассеяния дейтрона на неполяризованной мишени $\hat{f}(0) = Sp_i \hat{F}(0) \hat{\rho}_i = d + d_1 (\vec{S}\vec{n})^2$, где $\vec{n} = \vec{k}/k$, $\vec{k}$ – волновой вектор дейтрона, выражение (6) можно переписать в виде

$$\frac{d\hat{\rho}_d}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_d] - \frac{i}{\hbar} (\hat{V} \hat{\rho}_d - \hat{\rho}_d \hat{V}^+) + vN Sp_i \int d\Omega \hat{F}(\vec{k}') \hat{\rho}(\vec{k}') \hat{F}^+(\vec{k}'). \quad (8)$$

Последнее слагаемое в (8) описывает процесс многократного рассеяния и связанную с ним спиновую деполяризацию. Анализ показывает [11], что процесс спиновой деполяризации развивается на временах, много больших характерных периодов вращения спина, которые описываются первыми двумя слагаемыми (8). По этой причине последний член в (8) мы здесь рассматривать не будем.

Уравнения для скорости изменения вектора поляризации $\vec{p}$ и компонент тензора квадрупольной поляризации p_{ik} дейтронного пучка можно представить в виде

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{Sp_d \frac{d\hat{\rho}_d}{dt} \hat{S}}{I(t)} - \vec{p}(t) \frac{1}{I(t)} \frac{dI}{dt}, \quad (9)$$

$$\frac{dp_{ik}}{dt} = \frac{Sp_d \frac{d\hat{\rho}_d}{dt} \hat{Q}_{ik}}{I(t)} - p_{ik}(t) \frac{1}{I(t)} \frac{dI}{dt}. \quad (10)$$

Здесь $I(t) = Sp_d \hat{\rho}_d(t)$ – интенсивность пучка, $\hat{Q}_{ik} = \frac{3}{2} \left(\hat{S}_i \hat{S}_k + \hat{S}_k \hat{S}_i - \frac{4}{3} \delta_{ik} \hat{I} \right)$.

Используя (5) и (3), (8), (9) и (10), можно получить следующую систему уравнений, описывающую изменения вектора поляризации и тензора квадрупольной поляризации дейтрона с течением времени ($\vec{n} = \vec{k}/k$, $p_{xx} + p_{yy} + p_{zz} = 0$):

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\vec{p}}{dt} &= [\vec{p} \times \vec{\Omega}(d)] + \frac{\chi}{2} (\vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{p}) + \vec{p}) + \frac{\eta}{3} [\vec{n} \times \vec{n}'] - \\ &\quad - \frac{2\chi}{3} \vec{p} - \frac{\chi}{3} (\vec{n} \cdot \vec{n}') \vec{p} - \frac{2}{3} \frac{\alpha_T \vec{E}_{eff}^2}{\hbar} [\vec{n}_E \times \vec{n}'_E], \\ \frac{dp_{ik}}{dt} &= -(\varepsilon_{jkr} p_{ij} + \varepsilon_{jir} p_{kj}) \Omega_r(d) + \\ &\quad + \chi \left\{ -\frac{1}{3} \delta_{ik} + n_i n_k + \frac{1}{3} p_{ik} - \frac{1}{2} (n'_i n_k + n_i n'_k) + \frac{1}{3} (\vec{n} \cdot \vec{n}') \delta_{ik} \right\} + \\ &\quad + \frac{3\eta}{4} ([\vec{n} \times \vec{p}]_i n_k + n_i [\vec{n} \times \vec{p}]_k) - \frac{\chi}{3} (\vec{n} \cdot \vec{n}') p_{ik} - \\ &\quad - \frac{3}{2} \frac{\alpha_T \vec{E}_{eff}^2}{\hbar} ([\vec{n}_E \times \vec{p}]_i n_{E,k} + n_{E,i} [\vec{n}_E \times \vec{p}]_k), \end{aligned} \right. \quad (11)$$

где $\chi = -\frac{4\pi v N}{k} \text{Im} d_1 = -v N (\sigma_1 - \sigma_0)$, $\alpha = -\frac{4\pi v N}{k} \text{Im} d = -v N \sigma_0$, σ_1 и σ_0 – полные сечения рассеяния дейтрона на неполяризованных ядрах мишени для спиновых состояний дейтрона, обладающих магнитными квантовыми числами $M=1$ и $M=0$ соответственно, $\eta = -\frac{4\pi v N}{k} \text{Re} d_1$, $n'_i = p_{ik} n_k$, $n'_{E,i} = p_{ik} n_{E,k}$, $\vec{E}_{eff} = \vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B}$, $\Omega_r(d)$ – компоненты вектора $\vec{\Omega}(d)$ (1) ($r = 1, 2, 3$ соответствует x, y, z).

Из (11) вытекает, что изменения компонент вектора поляризации и тензора квадрупольной поляризации, происходящие за счет ЭДМ, смешиваются с соответствующими вкладами, обусловленными эффектами двойного лучепреломления.

Предположим, что направление векторов $\vec{B}$, $\vec{E}$ и $\vec{n}$ взаимно перпендикулярно. В этом случае суммарный поворот спина складывается из: а) поворота в $(\vec{E}, \vec{n})$ плоскости, который обусловлен взаимодействием магнитного момента с внешними полями, с частотой вращения, описываемой выражением

$$\vec{\omega}_a = \frac{e}{m} \left\{ a\vec{B} + \left(\frac{1}{\gamma^2 - 1} - a \right) \frac{\vec{\beta} \times \vec{E}}{c} \right\};$$

б) поворота в вертикальной плоскости $(\vec{B}, \vec{n})$ за счет наличия электрического дипольного момента, с частотой

$$\vec{\omega}_d = d \frac{c}{\hbar} \left(\frac{\vec{E}}{c} + \vec{\beta} \times \vec{B} \right); \quad (12)$$

в) вращения в вертикальной плоскости $(\vec{E}, \vec{B})$, перпендикулярной направлению $\vec{n}$, которое обусловлено эффектом двойного лучепреломления в среде, с частотой

$$\omega = \frac{2\pi N v}{k} \text{Re} d_1 = \frac{2\pi N}{m} \hbar \text{Re} d_1; \quad (13)$$

д) поворота в плоскости $(\vec{B}, \vec{n})$ за счет эффекта двойного лучепреломления в электрическом поле, при соответствующей частоте

$$\omega_E = \frac{\alpha_T (\vec{E} + c\vec{\beta} \times \vec{B})^2}{\hbar}. \quad (14)$$

Сопоставим величины частот вращения спина дейтрона за счет ЭДМ и эффекта двулучепреломления. Частота вращения спина вследствие наличия ЭДМ, определяемая формулой (12), для накопителя с $E = 3.5$ МВ/м, $B = 0.2$ Тл и ожидаемой величиной ЭДМ дейтрона $d \sim 10^{-29} e \cdot \text{см}$ (энергия дейтронного пучка 2 ГэВ) составляет $\omega_{edm} \approx 3.7 \cdot 10^{-9}$ рад/с. Оценим частоту вращения, обусловленную псевдоэлектрическим полем газовой мишени. Так как мишень имеет конечную длину, то выражение для соответствующей частоты отличается от формулы

(13), справедливой для случая сплошной среды. В данном случае эффективная частота вращения (угол вращения за $\tau = 1$ с) определяется следующим образом:

$$\omega_{\text{eff}} \equiv \varphi_i = \frac{2\pi j}{k} \text{Red}_1 \nu,$$

где ω_{eff} – эффективная частота вращения спина, φ_i – угол поворота спина в мишени за $\tau = 1$ с, $j = N_i l$ – число частиц в единице площади сечения, N_i – число атомов мишени в единице объема, l – длина мишени, ν – частота вращения пучка в накопителе, $k = mv/\hbar$ – волновой вектор дейтрона. Тогда, используя параметры эксперимента, приведенные в [7], при $j \sim 10^{19} \text{ м}^{-2}$, $\nu = 6.76 \cdot 10^5$, имеем $\omega_{\text{eff}} \approx 1.3 \cdot 10^{-5} \text{ рад/с}$.

Таким образом, частота вращения вектора поляризации за счет эффекта двулучепреломления в газовой мишени превосходит частоту вращения, обусловленную наличием дипольного момента на три порядка.

Величина частоты вращения спина вследствие двулучепреломления в электрическом поле, согласно (14), для $\alpha_T \sim 10^{-40} \text{ см}^3$ составляет $\omega_E \sim 0.6 \cdot 10^{-6} \text{ рад/с}$.

Проведем расчет величины спинового дихроизма. Данная характеристика описывается параметром $\chi = -zN(\sigma_1 - \sigma_0)$ (11). В случае, если пучок проходит через газовую струю (газовую мишень), то за время вращения в накопителе $\tau = 1$ с имеем

$$|\chi_i| = j(\sigma_1 - \sigma_0)\nu. \quad (15)$$

Из (15) следует, что для $j \sim 10^{19} \text{ м}^{-2}$ и $\nu = 6.76 \cdot 10^5$, $\chi_i \sim 6.8 \cdot 10^{-5}$. Следовательно, имеется значительный спиновый дихроизм пучка.

Таким образом, при проведении экспериментов по поиску ЭДМ дейтрона необходимо учитывать наличие поворота спина и спинового дихроизма, обусловленные эффектом двойного лучепреломления вследствие взаимодействия дейтрона с веществом мишени и с электромагнитным полем, существующим в накопительном кольце. Более того, в этих экспериментах можно измерить такие важные величины, как зависящую от спина часть упругого когерентного рассеяния дейтрона ядрами на нулевой угол, а также тензорную электрическую поляризуемость дейтрона.

Литература

1. Baryshevsky V. G. // Phys. Lett. 1992. Vol. 171A. P. 431.
2. Baryshevsky V. G. // J. Phys. 1993. Vol. 19G. P. 273.
3. Baryshevsky V., Rouba A. et al. // arXiv: hep-ph/0501045.
4. Baryshevsky V., Rathmann F. // Cosy Summer School. 2002. Vol. 1. P. 12.
5. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. 1968. Ч. 1. С. 173.
6. Montague B. W. // Phys. Reports. 1984. Vol. 113, № 1. P. 1.
7. Farley F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93, № 5. P. 052001.

8. *Orlov Y. F.* // STORI'05, 6th Int. Congress on Nuclear Physics at Storage Ring. Jülich-Bonn. 2005. P. 223.
9. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // arXiv: hep-ph/0506135.
10. *Baryshevsky V., Shekhtman A.* // Phys. Rev. 1996. Vol. 53C. P. 267.
11. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Cherkas S. L.* // arXiv: hep-ph/9907464.

**SPIN OSCILLATIONS AND SPIN DICHROISM
(THE BIREFRINGENCE EFFECT) OF DEUTERONS
ROTATING IN A STORAGE RING**

V. G. Baryshevsky, A. R. Shyrvel

It is shown that the Bargman-Myshel-Telegdy equation does not completely describe the evolution of deuteron spin characteristics in the storage ring, that's why the terms corresponding to the birefringence effect in a substance and both in pseudoelectric and ordinary electric fields should be added to the BMT equation. The phenomenon of deuteron birefringence can imitate the spin rotation due to the EDM. The study of this effect also enables to measure both the spin-dependent part of the amplitude of the coherent elastic scattering by the nuclei through zero angle and the tensor electric polarizability of a deuteron.

ТЕНЗОРНАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ДЕЙТРОНА В ЭКСПЕРИМЕНТАХ В НАКОПИТЕЛЬНЫХ КОЛЬЦАХ

А. Я. Силенко

1. Введение

Электрическая и магнитная поляризуемости являются важными свойствами дейтрона и других ядер. Тензорные электрическая и магнитная поляризуемости определяются взаимодействием спинов нуклонов. Измерение тензорной электрической поляризуемости дейтрона дает важную информацию о взаимодействии спинов нуклонов и предоставляет прекрасную возможность проверки теории зависящих от спина ядерных сил.

Метод определения этой важной электромагнитной характеристики дейтрона был предложен В. Г. Барышевским и др. [1, 2, 3]. Если электрическое поле действует на пучок дейтронов, циркулирующий в накопительном кольце, то наличие тензорной электрической поляризуемости ведет к появлению взаимодействия, квадратичного по спину. Когда электрическое поле осциллирует с резонансной частотой, имеет место эффект, аналогичный ядерному магнитному резонансу. Этот эффект стимулирует рост вертикальной поляризации дейтронов [1, 2, 3].

В настоящей работе мы выводим общие формулы, описывающие рост вертикальной поляризации (РВП), обусловленный тензорной электрической поляризуемостью дейтрона в накопительных кольцах (эффект Барышевского). Другой эффект, определяемый тензорной магнитной поляризуемостью дейтрона, заключается во вращении спина в горизонтальной плоскости с двумя частотами вместо ожидаемого вращения с g -2-частотой [1, 2, 3]. В работах [1, 2, 3] был использован подход, основанный на решении уравнений, определяющих динамику вектора и тензора поляризации. Для проверки полученных результатов и вывода общих формул, описывающих эффект, мы следуем совершенно другому методу спиновых амплитуд [4, 5], который в настоящей работе частично изменен. Мы используем матричный гамильтониан для определения эволюции спиновой волновой функции.

Наличие у дейтрона электрического дипольного момента (ЭДМ) также ведет к РВП дейтронного пучка. Эксперимент по поиску ЭДМ (ЭДМ-эксперимент) планируется проводить с пучком дейтронов в накопительном кольце [6, 7, 8]. Поскольку эффект Барышевского может имитировать существование ЭДМ, он должен быть учтен в ЭДМ-эксперименте с пучком дейтронов. Наличие у дейтрона тензорной электрической поляризуемости существенно влияет на проведение этого эксперимента [1, 2, 3].

Мы используем систему единиц $\hbar = c = 1$.

2. Гамильтонов подход в методе спиновых амплитуд

Метод спиновых амплитуд использует формализм квантовой механики для упрощения описания динамики спина [4, 5]. Использование этого формализма

для частиц со спином $1/2$ математически более выгодно, поскольку определить динамику двухкомпонентной волновой функции (спинора) проще, чем динамику трехкомпонентного вектора поляризации $\mathbf{P}$. Соотношение между ними определяется средним значением оператора $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\mathbf{P} = \Psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} C_{+1/2}(t) \\ C_{-1/2}(t) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $C_{+1/2}(t)$ и $C_{-1/2}(t)$ – зависящие от времени амплитуды. Матрицы Паули вместе с единичной матрицей являются генераторами неприводимого представления группы $SU(2)$.

Алгебраически группа $SU(2)$ является двойным покрытием трехмерной группы вращений $SO(3)$. Поэтому формализм, основанный на матрицах Паули, применим к частицам и ядрам с произвольным спином, если анализируется только вращение спина. Оно может быть исчерпывающе описано с помощью вектора поляризации $\mathbf{P}$:

$$P_i = \frac{\langle S_i \rangle}{S}, \quad i, j = x, y, z, \quad (2)$$

где S_i – это соответствующие спиновые матрицы и S – спиновое квантовое число. Вектор поляризации, или средний спин, является классической величиной [9], эволюция которой может быть исследована в рамках классической физики спина.

Частицы со спином $S \geq 1$ имеют также тензорную поляризацию. Она характеризуется тензором поляризации P_{ij} , который имеет вид [10]

$$P_{ij} = \frac{3 \langle S_i S_j + S_j S_i \rangle - 2S(S+1)\delta_{ij}}{2S(2S-1)}, \quad i, j = x, y, z. \quad (3)$$

Поскольку тензор поляризации удовлетворяет соотношениям $P_{ij} = P_{ji}$ и $P_{xx} + P_{yy} + P_{zz} = 1$, то он имеет пять независимых компонент. Дополнительные тензоры, состоящие из произведений трех и более спиновых матриц, необходимы только для полного описания поляризации частиц и ядер со спином $S \geq 3/2$.

Матрицы спина для частиц со спином 1 имеют вид

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Возможно, нетривиальная динамика спина, обнаруженная в работах [1, 2, 3] и обусловленная тензорной электрической поляризуемостью дейтрона, является первым примером важной роли, которую могут играть спин-тензорные взаимодействия в физике поляризованных пучков. Тензорное взаимодействие дейтрона также может быть описано с помощью метода спиновых амплитуд. В этом случае нужно использовать трехкомпонентные спиноры и матрицы 3×3 . Использо-

вание метода спиновых амплитуд математически выгодно, поскольку значительно проще производить анализ эволюции трехкомпонентных спиноров, чем трехкомпонентного вектора поляризации $\mathbf{P}$ и пяти независимых компонент тензора поляризации P_{ij} вместе взятых.

Мы следуем традиционному квантово-механическому подходу, прекрасно изложенному Р. Фейнманом [11] и используем матричное уравнение Гамильтона и матричный гамильтониан H для расчета эволюции спиновой волновой функции:

$$i \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_0(t) \\ C_{-1}(t) \end{pmatrix}, \quad H_{ij} = \langle i | H | j \rangle, \quad (5)$$

где H – это матрица 3×3 , Ψ – трехкомпонентная спиновая волновая функция, $H_{ij} = H_{ji}^*$ и $i, j = 1, 0, -1$. В данном уравнении H_{ij} – это матричные элементы оператора Гамильтона H .

Определение динамики спина может быть разделено на несколько этапов, а именно:

- а) решение уравнения Гамильтона (5) и определение собственных значений и собственных векторов (собственных волновых функций) матричного гамильтониана H ;
- б) вывод формулы для спиновой волновой функции, заключающийся в решении системы трех линейных алгебраических уравнений;
- в) расчет эволюции вектора и тензора поляризации.

3. Оператор Гамильтона в цилиндрической системе координат

Использование цилиндрических координат может быть весьма успешным, когда накопительное кольцо или имеет форму круга, или разделено на круговые секторы с промежутками между ними. Движение спина частиц в накопительных кольцах обычно определяется относительно траектории частиц, а основные поля, как правило, заданы относительно осей цилиндрической системы координат. Поэтому использование данной системы упрощает анализ вращения спина в горизонтальной плоскости ($g-2$ -прецессии) и других спиновых эффектов. Движение спина в цилиндрической системе координат отличается от движения спина в лабораторной системе, поскольку горизонтальные оси цилиндрической системы координат, соответствующие определенной частице, вращаются с циклотронной частотой. Уравнение движения спина в накопительных кольцах в цилиндрической системе координат имеет вид [12]

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\omega}_a \times \mathbf{S}, \quad \boldsymbol{\omega}_a = -\frac{e}{m} \left\{ a\mathbf{B} - \frac{a\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}) + \left(\frac{1}{\gamma^2-1} - a \right) (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{\gamma} \left[\mathbf{B}_{\parallel} - \frac{1}{\beta^2} (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E})_{\parallel} \right] + \frac{\eta}{2} \left(\mathbf{E} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}) + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $a = (g-2)/2$, $g = 2\mu m/(eS)$, $\eta = 2dm/(eS)$ и d – ЭДМ. Символ $\parallel$ означает

горизонтальную проекцию соответствующего вектора. В данной работе мы не рассматриваем спиновые эффекты, обусловленные явной зависимостью величины ω_a от радиальной и вертикальной компонент импульса частиц, которыми обычно можно пренебречь [12].

Исходя из работы [12] величина ω_a также равна

$$\omega_a = \Omega - \dot{\phi} \mathbf{e}_z, \quad (7)$$

где Ω – это угловая скорость, определяемая уравнением Томаса – Баргмана – Мишеля – Телегди (Т-БМТ) [13] с поправкой на ЭДМ [12, 14, 15, 16] и $\dot{\phi} \mathbf{e}_z$ – это мгновенная угловая скорость орбитального вращения.

Если бы мы использовали гамильтониан имеющей ЭДМ частицы, заданный в лабораторной системе [16], мы должны были бы использовать следующее представление матриц S_ρ и S_ϕ :

$$S_\rho = S_x \cos \phi + S_y \sin \phi, \quad S_\phi = -S_x \sin \phi + S_y \cos \phi. \quad (8)$$

Однако это представление спиновых матриц ведет к громоздким вычислениям, поскольку азимут ϕ , определяемый местоположением частицы, зависит от времени. Поэтому удобно рассматривать спиновые эффекты в системе отсчета, вращающейся с мгновенной частотой орбитального вращения, которая почти равна циклотронной частоте. Движение частиц в этой системе отсчета является относительно медленным, поскольку оно может быть обусловлено только осцилляциями пучка и другими отклонениями частиц от идеальной траектории. Уравнения движения спина во вращающейся системе отсчета и в цилиндрической системе координат совпадают, поскольку горизонтальные оси цилиндрической системы координат вращаются с мгновенной частотой орбитального вращения.

Гамильтонианы частицы во вращающейся системе отсчета и в лабораторной системе (H и H_{lab} соответственно) связаны соотношением [17, 18]

$$H = H_{lab} - \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad (9)$$

где $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость вращения наблюдателя. В рассматриваемом случае эта угловая скорость совпадает с мгновенной угловой скоростью орбитального вращения. Соотношение между гамильтонианом в лабораторной системе и угловой скоростью, определяемой уравнением Т-БМТ, имеет вид

$$H_{lab} = H_0 + \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega},$$

где H_0 является суммой всех не зависящих от спина операторов. Следовательно, гамильтониан частицы во вращающейся системе отсчета имеет вид

$$H = H_0 + \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\omega}_a, \quad (10)$$

где $\boldsymbol{\omega}_a$ определяется уравнением (6). Очевидно, что гамильтониан (10) согласуется с уравнением (6).

Частица во вращающейся системе отсчета локализована и в идеале покоится. Следовательно, мы можем направить оси x и y в этой системе соответственно вдоль радиальной и продольной осей. Такая процедура обычно использу-

ется для частиц со спином 1/2 [4, 5, 10]. В данном случае она приводит к прямой подстановке спиновых матриц (4) вместо S_ρ и S_ϕ :

$$S_\rho = S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_\phi = S_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Матрица S_z остается неизменной.

Использование подстановки (11) существенно упрощает вычисления.

Если какое-либо взаимодействие приводит к поправке к оператору Гамильтона (10) и не оказывает заметного влияния на движение частицы, то данная поправка имеет тот же самый вид в лабораторной системе и во вращающейся системе отсчета.

Мы полагаем, что вектор $\mathbf{B}$ направлен вверх. Для дейтрона $a < 0$ и $(\omega_a)_z > 0$.

4. Поправки к оператору Гамильтона на электрическую и магнитную поляризуемости дейтрона

Поправки к оператору Гамильтона на электрическую и магнитную поляризуемости дейтрона содержат скалярные и тензорные части. Скалярные части не зависят от спина и могут не учитываться. В работах [1, 2, 3] получены общие формулы, применимые при расчетах с точностью до членов первого порядка по нормализованной скорости $\beta = v/c$. В настоящей работе мы выводим точные формулы для конфигурации основных полей, соответствующей эксперименту по поиску ЭДМ дейтрона резонансным методом [6, 7]. Поскольку планируется, что лоренц-фактор будет равен $\gamma = 1.28$ [8], точные релятивистские формулы необходимы.

С точностью до слагаемых первого порядка по β , гамильтониан взаимодействия, зависящий от электрической и магнитной поляризуемостей, имеет вид

$$V = V_e + V_m = -\frac{1}{2} \alpha_{ik} E'_i E'_k - \frac{1}{2} \beta_{ik} B'_i B'_k, \quad (12)$$

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{B} - \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E},$$

где α_{ik} и β_{ik} – электрическая и магнитная поляризуемости, $\mathbf{E}'$ и $\mathbf{B}'$ – эффективные поля, действующие на частицу (поля во вращающейся системе отсчета, практически равные полям в системе покоя частицы). В этом приближении зависящая от спина часть гамильтониана, определяемая электрической и магнитной тензорными поляризуемостями [1–3] равна

$$V = -\alpha_T (\mathbf{S} \cdot \mathbf{E}')^2 - \beta_T (\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}')^2, \quad (13)$$

где α_T и β_T – электрическая и магнитная тензорные поляризуемости.

Эффект Барышевского имеет место при стимулировании когерентных продольных колебаний частиц с резонансной частотой. Угловая частота стимулиро-

ванных продольных колебаний ω равна разности между двумя радиочастотами [8]. Она должна быть очень близка к угловой частоте вращения спина ($g-2$ -частоте) ω_0 и близка к собственной частоте свободных синхротронных колебаний (синхротронной частоте) [8]. Резонансное электрическое поле в системе покоя частицы имеет осциллирующую продольную компоненту E'_ϕ , определяемую преобразованием Лоренца продольного электрического поля в точке нахождения осциллирующей частицы, и радиальную компоненту E'_ρ , определяемую преобразованием Лоренца вертикального магнитного поля. Последняя компонента имеет резонансную часть вследствие модуляции скорости частицы. В настоящей работе мы исследуем влияние резонансных полей на РВП в идеальных условиях и не рассматриваем систематические ошибки, указанные в разделе VII. Поэтому мы учитываем только основные поля – постоянное вертикальное магнитное и осциллирующее продольное электрическое.

Релятивистские формулы для полей в системе покоя частицы $\mathbf{E}'$ и $\mathbf{B}'$, имеют вид

$$\mathbf{E}' = \beta\gamma B_z \mathbf{e}_\rho + E_\phi \mathbf{e}_\phi, \quad \mathbf{B}' = \gamma B_z \mathbf{e}_z. \quad (14)$$

Поля и электромагнитные моменты в лабораторной системе даны без штрихов.

Индукированные электрический и магнитный дипольные моменты в системе покоя частицы, обусловленные тензорными поляризуемостями, равны

$$\mathbf{d}' = \alpha_T \{ \mathbf{S}, (\mathbf{S} \cdot \mathbf{E}') \}, \quad \mathbf{m}' = \beta_T \{ \mathbf{S}, (\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}') \}, \quad (15)$$

где $\{ \dots, \dots \}$ обозначает антикоммутатор.

Поправка к оператору Гамильтона на тензорные поляризуемости дейтрона равна

$$V = V_{lab} = -\frac{1}{2} (\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}). \quad (16)$$

Эта поправка не меняет угловую частоту орбитального движения. В соответствии с уравнением (9), поправка во вращающейся системе отсчета и в лабораторной системе является той же самой. Поскольку индуцированные дипольные моменты пропорциональны эффективным полям в системе покоя частицы, появляется множитель $1/2$.

Для нахождения дипольных моментов в лабораторной системе, $\mathbf{d}$ и $\mathbf{m}$, можно использовать оператор Гамильтона для релятивистских частиц с электрическим и магнитным дипольными моментами. Для частиц со спином $1/2$ он был выведен в работе [16]. Оператор Гамильтона для частиц со спином 1 имеет аналогичный вид, поскольку он должен соответствовать уравнению движения спина (обобщенному уравнению Т-БМТ), которое справедливо для частиц с произвольным спином.

Если мы пренебрегаем нормальным магнитным моментом $\mu_0 = eS/m$, который мал для ядер, соотношения между электромагнитными моментами в двух системах отсчета имеют вид

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}' - \frac{\gamma}{\gamma + 1} \boldsymbol{\beta}(\mathbf{d}' \cdot \boldsymbol{\beta}) - \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{m}', \quad \mathbf{m} = \mathbf{m}' - \frac{\gamma}{\gamma + 1} \boldsymbol{\beta}(\mathbf{m}' \cdot \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{d}'. \quad (17)$$

Когда $\mathbf{d} = e\mathbf{l}$, соотношение между $\mathbf{d}$ и $\mathbf{d}'$ следует из преобразования Лоренца для длины электрического диполя $\mathbf{l}$, поскольку заряд e – релятивистский инвариант. Формула (17) остается справедливой для индуцированных электромагнитных моментов.

В результате поправка к оператору Гамильтона во вращающейся системе отсчета имеет вид

$$V = -\frac{1}{2\gamma}(\mathbf{d}' \cdot \mathbf{E}' + \mathbf{m}' \cdot \mathbf{B}') = -\frac{\alpha_T}{\gamma}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{E}')^2 - \frac{\beta_T}{\gamma}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}')^2. \quad (18)$$

Уравнение (13) – это приближенная версия уравнения (18).

Уравнение колебательного движения частицы имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}. \quad (19)$$

Величина $\mathbf{E}$ в уравнении (19) – это электрическое поле в точке нахождения частицы. В результате когерентных колебаний пучка это поле осциллирует в системе покоя частицы. Угловая частота модуляции скорости ω существенно отличается от угловой частоты резонатора [6, 8], но должна быть очень близка к угловой частоте вращения спина ω_0 . Последняя величина почти равна вертикальной компоненте ω_a , поскольку другие компоненты этого вектора сравнительно малы:

$$\omega_0 \equiv (\omega_a)_z = -\frac{ea}{m} B_z. \quad (20)$$

Для дейтрона $\omega_0 > 0$.

Модуляция нормализованной скорости характеризуется выражением [6, 8]:

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{m^2 + p^2}} = \boldsymbol{\beta}_0 + \Delta\beta_0 \cdot \cos(\omega t + \varphi) \mathbf{e}_\varphi, \quad (21)$$

где

$$\boldsymbol{\beta}_0 = \frac{\mathbf{p}_0}{\sqrt{m^2 + p_0^2}}, \quad \gamma_0 = \frac{\sqrt{m^2 + p_0^2}}{m}.$$

Вследствие этой модуляции радиальное электрическое поле в системе покоя частицы имеет осциллирующую часть. Влияние модуляции на РВП описывается последним слагаемым в уравнении (6), пропорциональным $\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}$.

Можно произвести расчет электрического поля, действующего на частицу, с точностью до слагаемых первого порядка по $\Delta\beta_0$. Импульс частицы определяется выражением

$$\mathbf{p} = \frac{m\boldsymbol{\beta}}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \mathbf{p}_0 + \gamma_0^3 m \Delta\beta_0 \cdot \cos(\omega t + \varphi) \mathbf{e}_\varphi. \quad (22)$$

В результате дифференцирования уравнения (22) по времени и подстановки в уравнение (19) последнее приобретает вид

$$\mathbf{E} = -E_0 \sin(\omega t + \varphi) \mathbf{e}_\varphi, \quad (23)$$

где

$$E_0 = \frac{\gamma_0^3 m \omega}{e} \Delta \beta_0. \quad (24)$$

Уравнение (18) может быть преобразовано к виду

$$V = -\frac{\alpha_T}{\gamma} (\beta \gamma B_z S_\rho + E_\phi S_\phi)^2 - \beta_T \gamma B_z^2 S_z^2. \quad (25)$$

Оценка двух слагаемых в формуле для эффективного электрического поля $\mathbf{E}'$ (см. уравнение (14)) показывает, что член, пропорциональный магнитному полю B_z , для дейтрона значительно больше. Для упрощения вычислений мы пренебрегаем вкладом продольного электрического поля в это уравнение и используем приближение

$$V = -\gamma B_z^2 (\alpha_T \beta^2 S_\rho^2 + \beta_T S_z^2). \quad (26)$$

Величины γ и $\beta^2 \gamma$ могут быть разложены в ряд по степеням $\Delta \beta_0$:

$$\begin{aligned} \gamma &= \gamma_0 + \beta_0 \gamma_0^3 \cdot \Delta \beta_0 \cos(\omega t + \varphi) + \frac{1}{4} (1 + 3 \beta_0^2 \gamma_0^2) \gamma_0^3 (\Delta \beta_0)^2 \{1 + \cos[2(\omega t + \varphi)]\}, \\ \beta^2 \gamma &= \beta_0^2 \gamma_0 + (2 + \beta_0^2 \gamma_0^2) \beta_0 \gamma_0 \cdot \Delta \beta_0 \cos(\omega t + \varphi) + \\ &+ \frac{1}{4} (2 + 5 \beta_0^2 \gamma_0^2 + 3 \beta_0^4 \gamma_0^4) \gamma_0 (\Delta \beta_0)^2 \{1 + \cos[2(\omega t + \varphi)]\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Уравнения (26), (27) определяют поправки к оператору Гамильтона на тензорные поляризуемости дейтрона.

5. Решение матричного уравнения Гамильтона

Ненулевые матричные элементы, содержащиеся в уравнении (26), равны

$$(S_\rho^2)_{11} = (S_\rho^2)_{1,-1} = (S_\rho^2)_{-1,1} = (S_\rho^2)_{-1,-1} = \frac{1}{2}, \quad (S_\rho^2)_{00} = 1, \quad (S_z^2)_{11} = (S_z^2)_{-1,-1} = 1. \quad (28)$$

Следовательно, матричный гамильтониан (5) имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + \omega_0 + A + B & 0 & A \\ 0 & E_0 + 2A & 0 \\ A & 0 & E_0 - \omega_0 + A + B \end{pmatrix}, \quad (29)$$

где

$$\begin{aligned} A &= a_0 + a_1 \cos(\omega t + \varphi) + a_2 \cos[2(\omega t + \varphi)], \\ B &= b_0 + b_1 \cos(\omega t + \varphi) + b_2 \cos[2(\omega t + \varphi)], \end{aligned}$$

$$a_0 = -\frac{1}{2}\alpha_T B_z^2 \gamma_0 \left[\beta_0^2 + \frac{1}{4}(2 + 5\beta_0^2 \gamma_0^2 + 3\beta_0^4 \gamma_0^4)(\Delta\beta_0)^2 \right], \quad (30)$$

$$a_1 = -\frac{1}{2}\alpha_T B_z^2 (2 + \beta_0^2 \gamma_0^2) \beta_0 \gamma_0 \cdot \Delta\beta_0,$$

$$a_2 = -\frac{1}{8}\alpha_T B_z^2 (2 + 5\beta_0^2 \gamma_0^2 + 3\beta_0^4 \gamma_0^4) \gamma_0 (\Delta\beta_0)^2,$$

$$b_0 = -\beta_T B_z^2 \gamma_0 \left[1 + \frac{1}{4}(1 + 3\beta_0^2 \gamma_0^2) \gamma_0^2 (\Delta\beta_0)^2 \right],$$

$$b_1 = -\beta_T B_z^2 \beta_0 \gamma_0^3 \cdot \Delta\beta_0,$$

$$b_2 = -\frac{1}{4}\beta_T B_z^2 (1 + 3\beta_0^2 \gamma_0^2) \gamma_0^3 (\Delta\beta_0)^2,$$

E_0 – нулевой уровень энергии.

Вклад ЭДМ в гамильтониане (29) не учитывается.

Мы рассматриваем динамику спина вблизи резонанса. На первом этапе удобно перейти к новым амплитудам [11]. Это преобразование делает действительные части диагональных элементов матричного гамильтониана равными нулю. Однако мнимые части диагональных элементов для нестабильных частиц остаются ненулевыми [19]. Очевидно, что гамильтониан (29) – действительный, и новые амплитуды равны:

$$\begin{aligned} \gamma_1(t) &= \exp \left\{ i \left[k_1 t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} C_1(t), \\ \gamma_0(t) &= \exp \left\{ i \left[k_0 t + \frac{2a_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2}{\omega} g(t) \right] \right\} C_0(t), \\ \gamma_{-1}(t) &= \exp \left\{ i \left[k_{-1} t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} C_{-1}(t), \end{aligned} \quad (31)$$

$$k_1 = E_0 + \omega_0 + a_0 + b_0, \quad k_0 = E_0 + 2a_0, \quad k_{-1} = E_0 - \omega_0 + a_0 + b_0,$$

$$f(t) = \sin(\omega t + \varphi) - \sin(\varphi), \quad g(t) = \sin[2(\omega t + \varphi)] - \sin(2\varphi).$$

Динамика этих амплитуд не зависит от тензорной магнитной поляризуемости и определяется уравнением

$$\begin{cases} i \frac{d\gamma_1}{dt} = A \exp(2i\omega_0 t) \gamma_{-1}, \\ i \frac{d\gamma_0}{dt} = 0, \\ i \frac{d\gamma_{-1}}{dt} = A \exp(-2i\omega_0 t) \gamma_1. \end{cases} \quad (32)$$

Уравнения (31), (32) приводят к следующему соотношению:

$$C_0(t) = \exp \left\{ -i \left[k_0 t + \frac{2a_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2}{\omega} g(t) \right] \right\} C_0(0). \quad (33)$$

Компонента с нулевой проекцией спина не смешивается с другими компонентами.

На втором этапе можно усреднить по времени, значительно превышающему период продольных колебаний частиц [11]. Может быть использовано соотношение

$$\cos(\zeta t + \eta) = \frac{1}{2} \{ \exp[i(\zeta t + \eta)] + \exp[-i(\zeta t + \eta)] \}.$$

Существуют две резонансные частоты: $\omega = \omega_0$ и $\omega = 2\omega_0$. Первая из них соответствует условию резонанса в эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона [6, 7]. Вначале мы рассмотрим именно этот случай.

Когда $\omega \approx \omega_0$, усреднение по времени приводит к уравнению

$$\begin{cases} i \frac{d\gamma_1}{dt} = \frac{a_2}{2} \gamma_{-1} \exp \{ 2i[(\omega_0 - \omega)t - \varphi] \} \\ i \frac{d\gamma_{-1}}{dt} = \frac{a_2}{2} \gamma_1 \exp \{ -2i[(\omega_0 - \omega)t - \varphi] \} \end{cases}. \quad (34)$$

На третьем этапе мы используем следующее преобразование:

$$\begin{aligned} D_1(t) &= \exp[-i(\omega_0 - \omega)t] \gamma_1(t), \\ D_{-1}(t) &= \exp[i(\omega_0 - \omega)t] \gamma_{-1}(t). \end{aligned} \quad (35)$$

Преобразованное уравнение (34) может быть записано в матричном виде:

$$i \frac{dD}{dt} = H'D, \quad H' = \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \frac{a_2}{2} \exp(-2i\varphi) \\ \frac{a_2}{2} \exp(2i\varphi) & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} D_1(t) \\ D_{-1}(t) \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Уравнение (36) может быть решено аналитически, и его решение имеет вид:

$$\begin{aligned} D_1(t) &= \left[\frac{\omega' + \omega_0 - \omega}{2\omega'} D_1(0) + \frac{E}{2\omega'} D_{-1}(0) \right] \exp(-i\omega't) + \\ &+ \left[\frac{\omega' - (\omega_0 - \omega)}{2\omega'} D_1(0) - \frac{E}{2\omega'} D_{-1}(0) \right] \exp(i\omega't), \\ D_{-1}(t) &= \left[\frac{E^*}{2\omega'} D_1(0) + \frac{\omega' - (\omega_0 - \omega)}{2\omega'} D_{-1}(0) \right] \exp(-i\omega't) + \\ &+ \left[-\frac{E^*}{2\omega'} D_1(0) + \frac{\omega' + \omega_0 - \omega}{2\omega'} D_{-1}(0) \right] \exp(i\omega't) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} D_1(t) &= \left[\cos(\omega't) - i \frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \sin(\omega't) \right] D_1(0) - i \frac{E}{\omega'} \sin(\omega't) D_{-1}(0), \\ D_{-1}(t) &= -i \frac{E^*}{\omega'} \sin(\omega't) D_1(0) + \left[\cos(\omega't) + i \frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \sin(\omega't) \right] D_{-1}(0), \end{aligned}$$

где

$$\omega' = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + EE^*}, \quad E = \frac{a_2}{2} \exp(-2i\varphi). \quad (37)$$

Угловая частота осциллирующей спина равна $2\omega'$.

Исходные спиновые амплитуды приобретают вид:

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \exp \left\{ -i \left[(E_0 + \omega + a_0 + b_0)t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} D_1(t), \\ C_{-1}(t) &= \exp \left\{ -i \left[(E_0 - \omega + a_0 + b_0)t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} D_{-1}(t), \\ C_1(0) &= D_1(0), \quad C_{-1}(0) = D_{-1}(0). \end{aligned} \quad (38)$$

Резонанс на удвоенной частоте может быть исследован аналогично. Эволюция спиновых амплитуд определяется уравнениями:

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \exp \left\{ -i \left[\left(E_0 + \frac{\omega}{2} + a_0 + b_0 \right) t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} D_1(t), \\ C_0(t) &= \exp \left\{ -i \left[(E_0 + 2a_0)t + \frac{2a_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2}{\omega} g(t) \right] \right\} C_0(0), \\ C_{-1}(t) &= \exp \left\{ -i \left[\left(E_0 - \frac{\omega}{2} + a_0 + b_0 \right) t + \frac{a_1 + b_1}{\omega} f(t) + \frac{a_2 + b_2}{2\omega} g(t) \right] \right\} D_{-1}(t), \\ C_1(0) &= D_1(0), \quad C_{-1}(0) = D_{-1}(0), \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned} D_1(t) &= \left(\cos \frac{\omega''t}{2} - i \frac{2\omega_0 - \omega}{\omega''} \sin \frac{\omega''t}{2} \right) D_1(0) - i \frac{2E'}{\omega''} \sin \frac{\omega''t}{2} D_{-1}(0), \\ D_{-1}(t) &= -i \frac{2E'^*}{\omega''} \sin \frac{\omega''t}{2} D_1(0) + \left(\cos \frac{\omega''t}{2} + i \frac{2\omega_0 - \omega}{\omega''} \sin \frac{\omega''t}{2} \right) D_{-1}(0), \\ E' &= \frac{a_1}{2} \exp(-i\varphi) \end{aligned}$$

и угловая частота осциллирующей спина равна

$$\omega'' = \sqrt{(2\omega_0 - \omega)^2 + 4E'E'^*}. \quad (40)$$

6. Динамика спина, обусловленная тензорными поляризуемостями дейтрона

Для частиц со спином 1 три компоненты вектора поляризации и необходимые для расчета компоненты тензора поляризации имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 P_\rho &= \frac{1}{\sqrt{2}}(C_1 C_0^* + C_1^* C_0 + C_0 C_{-1}^* + C_0^* C_{-1}), \\
 P_\phi &= \frac{i}{\sqrt{2}}(C_1 C_0^* - C_1^* C_0 + C_0 C_{-1}^* - C_0^* C_{-1}), \\
 P_z &= (C_1 C_1^* - C_{-1} C_{-1}^*), \\
 P_{\rho\rho} &= \frac{3}{2}(C_1 C_{-1}^* + C_1^* C_{-1} + C_0 C_0^*) - \frac{1}{2}, \\
 P_{\phi\phi} &= -\frac{3}{2}(C_1 C_{-1}^* + C_1^* C_{-1} - C_0 C_0^*) - \frac{1}{2}, \\
 P_{\rho\phi} &= i\frac{3}{2}(C_1 C_{-1}^* - C_1^* C_{-1}).
 \end{aligned} \tag{41}$$

Горизонтальные компоненты P_ρ и P_ϕ не дают необходимой информации об исследуемом эффекте, поскольку они испытывают быстрые осцилляции, обусловленные $g-2$ -прецессией. Изменение вертикальной компоненты P_z является сравнительно медленным процессом.

Величина P_z не зависит от C_0 . Поскольку $C_1 C_1^* = D_1 D_1^*$, $C_{-1} C_{-1}^* = D_{-1} D_{-1}^*$, РВП обусловлен тензорной электрической поляризуемостью и не зависит от тензорной магнитной. Однако это заключение неверно, если дейтрон обладает ЭДМ. В этом случае тензорная магнитная поляризуемость приводит к расщеплению резонансной частоты [1, 2, 3].

Когда $\omega \approx 2\omega_0$, эволюция вертикальной компоненты вектора поляризации описывается формулой

$$\begin{aligned}
 P_z(t) &= \left[1 - \frac{E_0^2}{\omega'^2} (1 - \cos(2\omega't)) \right] P_z(0) + \\
 &+ \frac{2E_0}{3\omega'} \left\{ \frac{1}{2} [P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)] \left[\frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \cos(2\varphi) (1 - \cos(2\omega't)) - \sin(2\varphi) \sin(2\omega't) \right] + \right. \\
 &\left. + P_{\rho\phi}(0) \left[\frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \sin(2\varphi) (1 - \cos(2\omega't)) + \cos(2\varphi) \sin(2\omega't) \right] \right\}, \quad E_0 = \frac{a_2}{2},
 \end{aligned} \tag{42}$$

где величины a_2 и ω' определяются уравнениями (30) и (37) соответственно.

Для векторно-поляризованного пучка дейтронов необходимые для расчета компоненты вектора и тензора поляризации определяются уравнением:

$$\begin{aligned}
P_z &= \cos(\theta), \quad P_{\rho\rho} = \frac{1}{2} [3 \sin^2(\theta) \cos^2(\psi) - 1], \\
P_{\phi\phi} &= \frac{1}{2} [3 \sin^2(\theta) \sin^2(\psi) - 1], \quad P_{\rho\phi} = \frac{3}{4} \sin^2(\theta) \sin(2\psi),
\end{aligned} \tag{43}$$

где θ и ψ – сферические углы, определяющие направление спина во вращающейся системе отсчета. Азимут $\psi = 0$ характеризует спин, направленный радиально наружу.

Проекция спина дейтрона на выделенное направление может быть равной нулю. Пучок, обладающий такой поляризацией, является тензорно поляризованным. Его векторная поляризация равна нулю. Компоненты вектора и тензора поляризации имеют вид:

$$\begin{aligned}
P_\rho &= P_\phi = P_z = 0, \quad P_{\rho\rho} = -3 \sin^2(\theta) \cos^2(\psi) + 1, \\
P_{\phi\phi} &= -3 \sin^2(\theta) \sin^2(\psi) + 1, \quad P_{\rho\phi} = -\frac{3}{2} \sin^2(\theta) \sin(2\psi),
\end{aligned} \tag{44}$$

где θ и ψ – сферические углы, определенные выше. Когда пучок имеет векторную поляризацию, уравнения (42), (43) приводят к соотношению:

$$\begin{aligned}
P_z(t) &= \left[1 - \frac{E_0^2}{\omega'^2} (1 - \cos(2\omega't)) \right] \cos(\theta) + \\
&+ \frac{E_0}{2\omega'} \sin^2(\theta) \left\{ \frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \cos[2(\psi - \varphi)] [1 - \cos(2\omega't)] + \sin[2(\psi - \varphi)] \sin(2\omega't) \right\}.
\end{aligned} \tag{45}$$

Если условие резонанса соблюдается точно, начальная поляризация пучка горизонтальна [$P_z(0) = 0$] и $\omega''t \ll 0$, уравнение (42) приобретает вид

$$P_z(t) = \frac{2}{3} a_2 t \left[P_{\rho\phi}(0) \cos(2\varphi) - \frac{P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)}{2} \sin(2\varphi) \right]. \tag{46}$$

В этом случае вертикальная компонента вектора поляризации растет линейно по времени и

$$\frac{dP_z}{dt} = \frac{2}{3} a_2 \left[P_{\rho\phi}(0) \cos(2\varphi) - \frac{P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)}{2} \sin(2\varphi) \right]. \tag{47}$$

Для резонанса на удвоенной частоте $\omega \approx 2\omega_0$ эволюция вертикальной компоненты вектора поляризации определяется формулой

$$\begin{aligned}
P_z(t) &= \left[1 - \frac{4E_0'^2}{\omega''^2} (1 - \cos(\omega''t)) \right] P_z(0) + \\
&+ \frac{2E_0'}{3\omega''} \left\{ [P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)] \left[\frac{2\omega_0 - \omega}{\omega''} \cos(\varphi) (1 - \cos(\omega''t)) - \sin(\varphi) \sin(\omega''t) \right] + \right. \\
&\left. + 2P_{\rho\phi}(0) \left[\frac{2\omega_0 - \omega}{\omega''} \sin(\varphi) (1 - \cos(\omega''t)) + \cos(\varphi) \sin(\omega''t) \right] \right\}, \quad E_0' = \frac{a_1}{2},
\end{aligned} \tag{48}$$

где величины a_1 и ω'' определяются уравнениями (30) и (40) соответственно.

Если условие резонанса соблюдается точно, начальная поляризация пучка горизонтальна и $\omega''t \ll 0$, уравнение (48) приобретает вид

$$P_z(t) = \frac{2}{3} a_1 t \left[P_{\rho\phi}(0) \cos(\varphi) - \frac{P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)}{2} \sin(\varphi) \right]. \quad (49)$$

Уравнения (30), (46) и (49) показывают, что удвоение резонансной частоты приводит к резкому усилению эффекта Барышевского. В то же время при удвоении частоты эффект ЭДМ становится нерезонансным и не оказывает влияния на динамику спина.

7. Измерение тензорной электрической поляризуемости дейтрона в экспериментах в накопительных кольцах

Чтобы обнаружить эффект Барышевского, необходимо стимулировать РВП, обусловленный тензорной электрической поляризуемостью дейтрона и избежать аналогичного эффекта, вызванного наличием магнитного момента. Известно, что магнитный резонанс имеет место, когда на частицу, помещенную в однородное вертикальное магнитное поле, также действует горизонтальное магнитное поле, осциллирующее на частоте, близкой к частоте вращения спина (см., например, [20]). Для горизонтально поляризованного пучка магнитный резонанс приводит к РВП.

Очевидно, магнитный резонанс не может иметь места для продольного электрического поля, поскольку только осциллирующее электрическое поле появляется в системе покоя частицы. Бетатронные колебания не могут вызвать резонансного эффекта, поскольку их частоты выбираются далекими от резонанса. Однако резонанс создается тензорной электрической поляризуемостью дейтрона. Электрическое поле в системе покоя частицы имеет осциллирующую продольную компоненту E'_ϕ и радиальную компоненту E'_ρ , обусловленную преобразованием Лоренца вертикального магнитного поля. Последняя компонента имеет резонансную часть вследствие модуляции скорости частицы.

Для создания резонанса должны быть использованы радиочастотные резонаторы. Электрическое поле генерируется вдоль центральной линии резонатора, а магнитное поле направлено перпендикулярно [21]. Магнитное поле вдоль центральной линии резонатора равно нулю. Если радиочастотные резонаторы идеально размещены и продольно ориентированы, магнитное поле не может стимулировать какой-либо резонансный эффект. В этом случае наблюдаемый РВП соответствует определенному значению тензорной электрической поляризуемости.

Однако как смещение, так и угловое отклонение центральной линии резонатора относительно усредненной траектории частиц приводят к РВП, имитирующему эффект Барышевского. В результате они создают систематические ошибки измерения тензорной электрической поляризуемости. Однако, как правило, вызванное этими систематическими ошибками движение спина находится не в резонансе с прецессией спина в горизонтальной плоскости. Поэтому нали-

чие систематических ошибок создает шум и приводит к быстрым осцилляциям вертикальной компоненты вектора поляризации [6–8, 22]. Помимо этих эффектов, систематическая ошибка может создаваться радиальным магнитным полем в системе покоя частицы, осциллирующим с резонансной частотой. В эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона аналогичная ошибка будет устраняться путем попеременного создания двух пучков с различными частотами бетатронных колебаний [6, 8, 22]. В эксперименте по измерению тензорной электрической поляризуемости наличие резонансного радиального магнитного поля в системе покоя частицы значительно менее существенно при использовании тензорно поляризованного пучка (см. ниже). Мы рассчитываем только эффекты, создаваемые резонансными полями в идеальных условиях и не рассматриваем систематические ошибки. Таким образом, мы учитываем только постоянное вертикальное магнитное и осциллирующее продольное электрическое поля в лабораторной системе отсчета.

Для измерения тензорной электрической поляризуемости дейтрона в накопительных кольцах необходима конфигурация полей, аналогичная конфигурации, предложенной для ЭДМ-эксперимента [6, 7, 8]. Однако резонансная частота должна быть вдвое большей ($\omega \approx 2\omega_0$). Удвоение резонансной частоты не может быть произведено в накопительном кольце, разработанном для ЭДМ-эксперимента. В указанном эксперименте [8] собственная частота свободных синхротронных колебаний должна быть близка к $g-2$ -частоте ω_a , и резонанс создается биениями между двумя радиочастотами. Следовательно, для измерения тензорной электрической поляризуемости дейтрона требуется другое накопительное кольцо или, по крайней мере, радиочастотные резонаторы, отличные от резонаторов, разрабатываемых для ЭДМ-эксперимента.

Однако эффект Барышевского, обусловленный тензорной электрической поляризуемостью дейтрона, должен приниматься во внимание при проведении ЭДМ-эксперимента [1, 2, 3]. Этот эффект приводит к аналогичному РВП и может имитировать наличие ЭДМ порядка $d \sim 10^{-29}$ е·см. Достижение именно такой точности является целью ЭДМ-эксперимента в накопительных кольцах [6, 7, 8].

Детальный расчет зависящей от ЭДМ эволюции спина дейтрона был выполнен в работе [23]. Динамика вертикальной компоненты вектора поляризации определяется уравнением

$$P_z^{(EDM)}(t) = \frac{E_0}{\Omega'} \left\{ \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega'} \cos(\psi - \varphi) [1 - \cos(\Omega't)] + \sin(\psi - \varphi) \sin(\Omega't) \right\}, \quad (50)$$

где

$$\Omega' = |\mathbf{\Omega}'| = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + E_0^2}, \quad (51)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} dB_z \cdot \Delta\beta_0 \left(1 + \frac{a\gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right) \quad (52)$$

и азимут ψ определяет направление спина в начальный момент времени. Предполагается, что начальная поляризация пучка горизонтальна.

Если $\Omega't \ll 1$,

$$\begin{aligned} P_z^{(EDM)} &= E_0 t \sin(\psi - \varphi) = \\ &= -\frac{1}{2} dB_z \Delta \beta_0 \left(1 + \frac{a \gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right) t \sin(\psi - \varphi). \end{aligned} \quad (53)$$

Можно определить ожидаемую чувствительность при измерении тензорной электрической поляризуемости дейтрона путем сравнения уравнений (48) и (50) и использования уравнения (43) и сделанной в [8] оценки чувствительности эксперимента по поиску ЭДМ дейтрона. Для дейтрона $a = a_d = -0.14299$. Чувствительность к ЭДМ величины $d = 1 \times 10^{-29}$ е·см соответствует измерению тензорной электрической поляризуемости с точностью $\delta\alpha_T = 1.2 \times 10^{-43}$ см³, когда $\omega \approx 2\omega_0$ и используются уравнения (48), (50) – (52). Эта оценка базируется на значениях $\gamma_0 = 1.28$, $\beta_0 = 0.625$, $\Delta v_0 = 3.5 \times 10^6$ м/с и $B_z = 3$ Т [8]. Существуют три независимых теоретических предсказания для величины тензорной электрической поляризуемости дейтрона, а именно $\alpha_T = -6.2 \times 10^{-41}$ см³ [24], -6.8×10^{-41} см³ [25] и 3.2×10^{-41} см³ [26]. Два первых значения очень близки друг к другу и не согласуются с последним значением.

По всей вероятности, наилучшая чувствительность измерения α_T может быть достигнута путем использования пучка дейтронов с тензорной поляризацией. Начальное направление тензорной поляризации должно быть горизонтальным. Когда векторная поляризация пучка равна нулю, не может происходить вращения спина. Следовательно, отсутствуют соответствующие систематические ошибки, обусловленные радиальным магнитным полем и другими причинами. В общем случае такие систематические ошибки пропорциональны остаточной векторной поляризации пучка. Это обстоятельство приводит к значительному повышению экспериментальной точности. Когда $\omega \approx 2\omega_0$, уравнение, описывающее эволюцию поляризации пучка, приобретает вид

$$\begin{aligned} P_z(t) &= -\frac{2E'_0}{\omega''} \sin^2(\theta) \left\{ \frac{2\omega_0 - \omega}{\omega''} \cos(2\psi - \varphi) [1 - \cos(\omega''t)] + \right. \\ &\quad \left. + \sin(2\psi - \varphi) \sin(\omega''t) \right\}. \end{aligned} \quad (54)$$

В этом случае можно сделать следующую предварительную оценку экспериментальной точности: $\delta\alpha_T \sim 10^{-45} \div 10^{-44}$ см³.

Когда $\theta = \pi/2$, естественный выбор фазы

$$\varphi = 2\psi \pm \frac{\pi}{2}$$

приводит уравнение (54) к виду:

$$P_z(t) = \pm \frac{2E'_0}{\omega''} \sin(\omega''t). \quad (55)$$

Другие возможности, $\varphi = 2\psi$ и $\varphi = 2\psi \pm \pi$, приводят к уравнению

$$P_z(t) = \pm \frac{4E'_0(2\omega_0 - \omega)}{\omega''^2} \sin^2\left(\frac{\omega''t}{2}\right). \quad (56)$$

Зависимость $P_z(t)$ от времени становится квадратичной, когда $\omega''t \ll 1$. Следовательно, эти возможности менее важны для эксперимента. Однако они могут быть использованы для проверки результатов.

Эксперимент по измерению тензорной электрической поляризуемости дейтрона существенно отличается от эксперимента по поиску ЭДМ дейтрона отсутствием необходимости тщательного устранения систематических ошибок, обусловленных возможным наличием резонансного горизонтального магнитного поля в системе покоя дейтрона. Использование пучка дейтронов с тензорной поляризацией позволяет избежать любого вращения спина и устранить любые связанные с ним систематические ошибки. РВП такого пучка определяется только тензорной электрической поляризуемостью дейтрона. Это является большим преимуществом, поскольку устранение указанных систематических ошибок является основной проблемой для эксперимента по поиску ЭДМ дейтрона [8, 22]. Остаточная векторная поляризация пучка вместе с резонансным горизонтальным магнитным полем в системе покоя дейтрона могут приводить к появлению ложного сигнала. Однако необходимая коррекция измеренного значения РВП может быть сделана путем использования пучка с продольной векторной поляризацией. Важно, что РВП, обусловленный любой систематической ошибкой, меняет знак и РВП, определяемый тензорной электрической поляризуемостью, остается неизменным при изменении поляризации пучка с горизонтальной векторной поляризацией на противоположную (см. уравнение (45)). Это свойство позволяет легко произвести дифференциацию между эффектом Барышевского и ложными сигналами для пучка с векторной поляризацией. По всей вероятности, эксперимент по измерению тензорной электрической поляризуемости дейтрона может быть поставлен на одном из существующих накопительных колец.

8. Разделение эффектов, обусловленных электрическим дипольным моментом и тензорной электрической поляризуемостью в эксперименте по поиску электрического дипольного момента дейтрона

Уравнения (42) и (50) – (52), описывающие влияние тензорной электрической поляризуемости и ЭДМ на динамику спина в эксперименте по поиску электрического дипольного момента, существенно различаются. Поэтому эффекты, обусловленные ЭДМ и тензорной электрической поляризуемостью, могут быть разделены.

Когда начальная поляризация пучка дейтронов горизонтальна, уравнение (45) приобретает вид

$$P_z^{(tensor)}(t) = \frac{E_0}{2\omega'} \left\{ \frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \cos[2(\psi - \varphi)] [1 - \cos(2\omega't)] + \sin[2(\psi - \varphi)] \sin(2\omega't) \right\}. \quad (57)$$

Для ЭДМ-эксперимента необходим выбор фазы

$$\varphi = \psi \pm \frac{\pi}{2}.$$

Этот выбор приводит к уравнению

$$P_z^{(EDM)}(t) = \pm \frac{E_0}{\Omega'} \sin(\Omega't), \quad P_z^{(tensor)}(t) = \pm \frac{E_0(\omega_0 - \omega)}{\omega'^2} \sin^2(\omega't). \quad (58)$$

Поскольку величины E_0, E_0 очень малы, $\Omega' \approx \omega' \approx |\omega_0 - \omega|$. Если мы ограничиваемся анализом отношения амплитуд в уравнении (58), которое приблизительно равно $2E_0/E_0$, мы получаем, что значения α_T , найденные в [24, 25, 26], соответствуют ЭДМ величины $|d| = 3 \times 10^{-29}, 3 \times 10^{-29}$ и 2×10^{-29} е·см соответственно. Однако вклад ЭДМ в P_z растет пропорционально времени t , когда $\Omega't \ll 1$, в то время как вклад тензорной электрической поляризуемости в этом случае пренебрежимо мал. Следовательно, сохранение частоты и фазы когерентных продольных колебаний почти равными частоте и фазе вращения спина позволяет устранить вклад тензорной электрической поляризуемости в РВП в ЭДМ-эксперименте. Такой же вывод был недавно сделан в работе [27]. Тем не менее наличие у дейтрона тензорной электрической поляризуемости должно учитываться. Чтобы зафиксировать возможное существование ЭДМ дейтрона, можно также использовать другие возможности разделения эффекта Барышевского и эффекта, создаваемого ЭДМ, описываемые ниже.

1. Динамика спина, обусловленная взаимодействиями первого порядка (включая эффект ЭДМ) и второго порядка (включая эффект Барышевского) определяется операторными уравнениями движения спина

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = A\mathbf{\Omega} \times \mathbf{S} \quad (59)$$

и

$$\frac{dS_i}{dt} = \beta_{ijk} S_j S_k \quad (60)$$

соответственно. Следовательно, эффект ЭДМ меняет знак при изменении поляризации пучка на противоположную, в то время как знак эффекта Барышевского остается неизменным.

2. Поскольку и эффект ЭДМ, и эффект Барышевского зависят от разности $\psi - \varphi$, изменение поляризации пучка на противоположную ($\psi \rightarrow \psi + \pi$) эквивалентно переходу к противоположной фазе ($\varphi \rightarrow \varphi + \pi$). Естественно, второй вариант технически проще.

Если два измерения РВП, выполненные в соответствии с пунктами 1 или 2, дают значения P_{z1} и P_{z2} , эффекты ЭДМ и Барышевского характеризуются значениями $(P_{z1} - P_{z2})/2$ и $(P_{z1} + P_{z2})/2$ соответственно.

3. В системе покоя частицы эффекты ЭДМ и Барышевского являются линейным и квадратичным по электрическому полю соответственно. Зависимость, даваемая экспериментом, может быть определена путем изменения амплитуды поля в резонаторах.

4. Эффект РВП также является медленно осциллирующим, и его частота, обусловленная эффектом Барышевского, приблизительно вдвое больше частоты эффекта, определяемого ЭДМ.

5. Использование тензорно поляризованного пучка дейтронов (даже при угловой частоте $\omega \approx \omega_0$) устраняет эффект ЭДМ и основные систематические ошибки. Эволюция поляризации пучка описывается формулой:

$$P_z^{(tensor)}(t) = -\frac{a_2}{2\omega'} \left\{ \frac{\omega_0 - \omega}{\omega'} \cos[2(\psi - \varphi)] [1 - \cos(2\omega't)] + \sin[2(\psi - \varphi)] \sin(2\omega't) \right\}, \quad (61)$$

если начальная поляризация определяется уравнением (44).

Таким образом, эффекты, обусловленные ЭДМ и тензорной электрической поляризуемостью, могут быть эффективно разделены в эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона.

9. Обсуждение результатов и выводы

Динамика спина, обусловленная наличием у дейтрона и других ядер тензорной электрической поляризуемости, была впервые рассчитана в работах [1–3]. Чтобы сравнить наши результаты с результатами этих работ, удобно ввести эффективное поле, определяемое формулой

$$E_{eff}^2 = \beta^2 \gamma B_z^2. \quad (62)$$

В работах [1–3] описание эффекта производилось с точностью до членов первого порядка по β . В этом приближении квадрат эффективного поля равен

$$E_{eff}^2 = \left(E_{eff}^{(0)} \right)^2 + 2B_z^2 \beta_0 \cdot \Delta\beta_0 \cos(\omega t + \varphi) + \frac{1}{2} B_z^2 (\Delta\beta_0)^2 \cos[2(\omega t + \varphi)]. \quad (63)$$

Эволюция вектора поляризации характеризуется уравнениями (24), (29) в работе [2] и уравнениями (44), (49) в работе [3]. Результирующее уравнение имеет вид

$$\frac{dP_z}{dt} = -\frac{1}{2} \Delta\Omega_T \cos(2\Omega_f t + 2\varphi_f) \left[P_{\rho\phi}(0) \cos(2\Omega t) - \frac{P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)}{2} \sin(2\Omega t) \right], \quad (64)$$

где

$$\Delta\Omega_T = -\frac{2}{3} \alpha_T B_z^2 (\Delta\beta_0)^2, \quad (65)$$

Ω соответствует нашему обозначению ω_0 и $\varphi_f = \varphi + \pi/2$. В работах [1–3] полагалось, что вертикальная ориентация вектора угловой скорости вращения спина ($\omega_0 > 0$) соответствует вращению спина по часовой стрелке, а в настоящей

работе – против часовой стрелки. Следовательно, $\Omega_f \approx -\Omega$ и усреднение уравнения (64) по времени с учетом уравнения (65) приводит к следующей формуле:

$$\frac{dP_z}{dt} = -\frac{1}{12} \alpha_T B_z^2 (\Delta\beta_0)^2 \{ 2P_{\rho\rho}(0) \cos(2\varphi) - [P_{\rho\rho}(0) - P_{\phi\phi}(0)] \sin(2\varphi) \}. \quad (66)$$

Эта формула полностью согласуется с уравнением (47).

Согласие результатов, полученных в [2, 3] и в настоящей работе, подтверждает их правильность. Метод, использованный в работах [2, 3], менее удобен для расчета динамики спина в осциллирующих внешних полях, чем в статических. В теории магнитного резонанса обычно используется переход к вращающейся системе отсчета [20]. Очевидно, переход к такой системе отсчета необходим для нахождения динамики спина с помощью метода, использованного в [2, 3], когда $\omega \neq \omega_0$ ($\Omega \neq |\Omega_f|$).

Рассчитанный эффект РВП, который является следствием наличия у дейтрона тензорной электрической поляризуемости, – это впечатляющий пример новой физики спина, обусловленной тензорным взаимодействием. В рассматриваемом случае эволюция спина дейтрона обусловлена электромагнитным взаимодействием. В работах В. Г. Барышевского [28, 29] исследован подобный эффект, вызванный сильным взаимодействием дейтрона с ядрами. Причиной этих эффектов, стимулированных тензорным взаимодействием, является трансформация тензорной поляризации в векторную и наоборот.

Уравнение (37) показывает, что состояние со спином, направленным вверх, трансформируется в состояние со спином, направленным вниз, и наоборот. Это свойство обусловлено недиагональными слагаемыми в гамильтониане (36). В результате вертикальная компонента вектора поляризации осциллирует. Это явление аналогично двулучепреломлению света в кристаллах [28, 29].

Аналогичное поведение спина имеет место при ядерном магнитном резонансе (ЯМР), когда на ядро, помещенное в однородное вертикальное магнитное поле, действует и резонансное горизонтальное магнитное поле. Как известно, при ЯМР также происходят осцилляции P_z . Однако существует важное различие между двумя эффектами. Эффект Барышевского имеет место даже для тензорно поляризованного пучка, в то время как ЯМР не изменяет векторной поляризации пучка в этом случае.

Приведенные расчеты показывают, что эффект Барышевского в накопительных кольцах может быть обнаружен. Проведение измерений при резонансной частоте $\omega \approx 2\omega_0$ дает возможность измерить тензорную электрическую поляризуемость дейтрона с точностью до $10^{-45} \div 10^{-44} \text{ см}^3$ ($10^{-6} \div 10^{-5} \text{ фм}^3$).

Можно также производить эксперимент с дейтронами низких энергий в ловушке Пеннинга.

В настоящей работе исследована проблема влияния тензорной электрической поляризуемости на динамику спина в эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона в накопительных кольцах. Эффекты, обусловленные ЭДМ и тензорной электрической поляризуемостью, могут быть эффективно разделены.

Выведены общие формулы, описывающие РВП, обусловленный тензорной электрической поляризуемостью дейтрона. Полученные формулы согласуются с предшествующими результатами [1, 2, 3], полученными для более частного случая. Метод, основанный на использовании гамильтонова подхода и спиновых волновых функций, является весьма удобным для исследования эффекта.

Автор выражает благодарность В. Г. Барышевскому за постановку задачи и обсуждение полученных результатов. Работа поддержана грантом БРФФИ.

Литература

1. *Baryshevsky V. G., Shirvel A. R.* // hep-ph/0503214; *Baryshevsky V. G.* // hep-ph/0504064; STORI 2005 Conf. Proc., Schriften des Forschungszentrums Jülich, Matter and Materials. 2005. Vol. 30. P. 227.
2. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // hep-ph/0506135.
3. *Baryshevsky V. G.* // hep-ph/0510158, hep-ph/0603191.
4. *Courant E. D.* // Bull. Am. Phys. Soc. 1962. Vol. 7. P. 33; *Courant E. D., Ruth R. D.* // BNL Report No. 51270, 1980.
5. *Minty M. G., Zimmermann F.* Measurement and Control of Charged Particle Beams. 2003.
6. *Orlov Y. F.* // EDM in Storage Rings Internal Note. 2004. 69; STORI 2005 Conf. Proc., Schriften des Forschungszentrums Jülich, Matter and Materials. 2005. Vol. 30. P. 223.
7. *Semertzidis Y. K.* // STORI 2005 Conf. Proc., Schriften des Forschungszentrums Jülich, Matter and Materials. 2005. Vol. 30. P. 70.
8. *Orlov Y. F., Morse W. M., Semertzidis Y. K.* // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P. 214802.
9. *Lee D. S.* Spin Dynamics and Snakes in Synchrotrons. 1997. P.17.
10. *Mane S. R., Shatunov Yu. M., Yokoya K.* // Rep. Prog. Phys. 2005. Vol. 68. P. 1997.
11. *Feynman R., Leighton R. B., Sands M.* The Feynman Lectures on Physics. Vol. 2. 1963.
12. *Silenko A. J.* // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2006. Vol. 9. P. 034003.
13. *Bargmann V., Michel L., Telegdi V. L.* // Phys. Rev. Lett. 1959. Vol. 2. P. 435.
14. *Nelson D. F., Schupp A. A., Pidd R. W., Crane H. R.* // Phys. Rev. Lett. 1959. Vol. 2. P. 492.
15. *Nowakowski M., Paschos E. A., Rodriguez J. M.* // Eur. J. Phys. 2005. Vol. 26. P. 545.
16. *Силенко А. Я.* // Изв. вузов. Физика. 2005. Т. 48, № 8. С. 9; *Silenko A. J.* // Russ. Phys. J. 2005. Vol. 48. P. 788.
17. *Горбачев А. К.* Квантовая механика в общей теории относительности. 2003.
18. *Mashhoon B.* // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 2639; *Bini D., Cherubini C., Mashhoon B.* // Class. Quant. Grav. 2004. Vol. 21. P. 3893.
19. *Silenko A. J.* // Czech. J. Phys. 2006. Vol. 56. P. 281.
20. *Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance: with examples from solid state physics. 1963; *Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance, 3rd ed. 1990.
21. *Jackson J. D.* Classical Electrodynamics, 2nd ed. 1975.
22. *Semertzidis Y. K.* // EDM in Storage Rings Internal Notes Nos. 82, 85, and 92, 2005.
23. *Silenko A. J.* // hep-ph/0604095.
24. *Chen J.-W., Griebhammer H. W.* et al. // Nucl. Phys. A. 1998. Vol. 644. P. 221.
25. *Ji X., Li Y.* // Phys. Lett. B. 2004. Vol. 591. P. 76.
26. *Friar J. L., Payne G. L.* // Phys. Rev. C. 2005. Vol. 72. P. 014004.
27. *Orlov Y. F.* // Phys. Lett. A. 2006. Vol. 357. P. 120.
28. *Baryshevsky V. G.* // Phys. Lett. A. 1992. Vol. 171. P. 431.
29. *Baryshevsky V. G.* // J. Phys. G. 1993. Vol. 19. P. 273.

TENSOR ELECTRIC POLARIZABILITY OF THE DEUTERON IN STORAGE-RING EXPERIMENTS

A. J. Silenko

The tensor electric polarizability of the deuteron gives important information about spin-dependent nuclear forces. If a resonant horizontal electric field acts on a deuteron beam circulating into a storage ring, the tensor electric polarizability stimulates the buildup of the vertical polarization of the deuteron (the Baryshevsky effect). General formulas describing this effect have been derived. Calculated formulae agree with the previous results [1, 2, 3] obtained in a more particular case. The method based on the use of Hamiltonian approach and spin wave functions happens to be very convenient for the investigation of the effect. The problem of the influence of tensor electric polarizability on spin dynamics in such a deuteron electric-dipole-moment experiment in storage rings has been investigated. The EDM and Baryshevsky effects can be effectively differentiated. Doubling the resonant frequency used in this experiment dramatically amplifies the Baryshevsky effect and provides the opportunity to make high-precision measurements of the deuteron's tensor electric polarizability.

ДИНАМИКА СПИНА В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ПОИСКУ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ДИПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ ЧАСТИЦ, ПРОВОДИМЫХ В НАКОПИТЕЛЬНЫХ КОЛЬЦАХ

А. Я. Силенко

1. Введение

Весьма удобным способом описания взаимодействия релятивистских частиц с внешним полем и проведения квазиклассического перехода является преобразование Фолди – Ваутхойзена (ФВ) [1]. В представлении ФВ гамильтониан и все операторы имеют блок-диагональный вид (диагональны по двум спинорам). Соотношения между операторами полностью аналогичны соотношениям между соответствующими классическими величинами. Операторы в представлении ФВ имеют такой же вид, как в нерелятивистской квантовой теории. Только представление ФВ обладает совокупностью этих свойств, значительно упрощающих переход к квазиклассическому описанию. Именно представление ФВ обеспечивает наилучшую возможность получения классического предела релятивистской квантовой механики [1, 2, 3].

Мы используем термин « $g-2$ -прецессия» для любого вращения спина в горизонтальной плоскости накопительного кольца, поскольку оно определяется аномальной частью магнитного момента частиц и пропорционально $g-2$. Термин «спин» означает среднее значение квантово-механического оператора спина.

Для описания динамики спина в накопительных кольцах в настоящей работе используется цилиндрическая система координат. Существует много алгоритмов компьютерных вычислений, базирующихся на других системах координат (например, на координатах Френе – Серре [4]). Эти алгоритмы позволяют решить любую проблему динамики пучка и спина в накопительных кольцах. Однако для ряда прецизионных экспериментов аналитическое решение проблемы может быть необходимым. Мы имеем в виду $g-2$ [5, 6] и ЭДМ-эксперименты [7, 8], чувствительность которых исключительно высока. Использование цилиндрических координат для аналитических вычислений динамики спина может быть очень успешным, если конфигурация основных полей достаточно проста. Когда накопительное кольцо или имеет форму круга, или разделено на круговые секторы пустыми промежутками, использование цилиндрических координат для описания движения спина является совершенно естественным.

Прецизионный поиск электрических дипольных моментов (ЭДМ) фундаментальных частиц, ядер и атомов является прекрасным способом поиска новой физики вне Стандартной Модели [9]. Чтобы разделить прецессию спина, обусловленную ЭДМ и другими эффектами, необходимо адекватное математическое описание движения спина. В настоящей работе для этой цели предлагается использовать цилиндрическую систему координат, которая позволяет произвести точное аналитическое описание движения спина в накопительных кольцах. Такое описание производится в общем виде. Мы анализируем также проблему усреднения угловой скорости вращения спина.

Коллаборация по поиску ЭДМ частиц в накопительных кольцах исследует возможность поиска ЭДМ путем помещения частиц в накопительное кольцо и наблюдения за прецессией их спина [7, 8]. Метод замораживания спина [7, 8, 10], который заключается в устранении прецессии спина в горизонтальной плоскости с помощью радиального электрического поля, может обеспечить чувствительность измерений ЭДМ дейтрона порядка 10^{-27} е·см [8].

Резонансный метод, предложенный Ю. Орловым [11], позволяет достигнуть чувствительности порядка 10^{-29} е·см для дейтрона и 10^{-28} е·см для протона. Этот метод основан на идее, что прецессия, обусловленная ЭДМ дейтрона, будет накапливаться, если вызваны когерентные продольные колебания пучка, находящиеся в фазе с прецессией спина в горизонтальной плоскости. Данные колебания стимулируются осциллирующим продольным электрическим полем, и их частота должна быть очень близка к частоте прецессии спина. Резонансный эффект в накопительном кольце обеспечивается радиочастотными резонаторами [11, 12, 13].

Резонансный метод свободен от основной систематической ошибки измерения ЭДМ при помощи метода замораживания спина, заключающейся в наличии слабого вертикального магнитного поля [7, 8]. Это поле приводит к росту вертикальной поляризации (РВП), имитирующему наличие ЭДМ [7, 8].

В настоящей работе рассчитываются вклады электрического и магнитного полей в РВП в эксперименте по поиску ЭДМ частиц, проводимом резонансным методом (резонансом ЭДМ-эксперименте) [11, 12, 13]. Мы выводим формулы для резонансных напряженностей. Мы также анализируем отличительные черты резонансного ЭДМ-эксперимента для дейтронов и протонов и определяем динамику компонент вектора поляризации.

В работе используется система единиц $\hbar = c = 1$. Скорость света c будет явно включена в некоторые уравнения.

2. Вывод оператора Гамильтона и квантово-механического уравнения движения спина в представлении Фолди – Ваутхойзена для частиц с электрическим дипольным моментом

В настоящей работе используется наиболее строгий метод нахождения уравнения движения спина, основанный на выводе оператора Гамильтона в представлении ФВ, квантово-механического уравнения движения спина и последующем проведении квазиклассического перехода. Весьма важно, что в представлении ФВ очень простой вид имеют операторы координат $\mathbf{r}$, импульса $\mathbf{p} = -i\nabla$ и поляризации

$$\mathbf{\Pi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix},$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – матрица Паули. В других представлениях эти операторы выражаются значительно более громоздкими формулами [1, 3]. Это делает представление ФВ исключительно удобным для нахождения уравнений движения частиц и спина. В частности, операторное уравнение движения спина определяется формулой

$$\frac{d\Pi}{dt} = i[H, \Pi]. \quad (1)$$

Для нахождения квазиклассического уравнения движения спина необходимо произвести усреднение по волновым функциям [3].

В работе [3] был найден оператор Гамильтона в представлении Фолди – Ваутхойзена для релятивистских частиц со спином 1/2, взаимодействующих с электромагнитным полем. Вычисления проведены с точностью до производных от электрической и магнитной напряженностей внешнего поля (в общем случае нестационарного) и с учетом наличия у частиц аномального магнитного момента (АММ).

Мы проведем преобразование ФВ для релятивистских частиц с АММ и ЭДМ, взаимодействующих с электромагнитным полем. Метод преобразования детально описан в работе [3].

Учет ЭДМ может быть произведен путем включения в гамильтониан Дирака – Паули, описывающий взаимодействие частиц с АММ с электромагнитным полем, слагаемых, характеризующих ЭДМ. Уравнение Дирака – Паули имеет вид

$$[\gamma^\mu \pi_\mu - m + \frac{\mu'}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}] \Psi = 0, \quad \pi_\mu = p_\mu - eA_\mu, \quad (2)$$

где γ^μ – матрицы Дирака, $F_{\mu\nu}$ – тензор электромагнитного поля, p^μ и $A^\mu = (\Phi, \mathbf{A})$ – четырехмерные импульс частицы и потенциал внешнего поля, $\sigma^{\mu\nu} = i(\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu)/2$, m – масса покоя, μ' – АММ частицы.

Соответствующий гамильтониан в представлении ФВ, не учитывающий ЭДМ, определяется выражением [3]

$$\begin{aligned} H = & \beta \varepsilon' + e\Phi + \frac{1}{4} \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon' + m} + \mu' \right) \frac{1}{\varepsilon'}, (\boldsymbol{\Sigma} \{ \boldsymbol{\pi} \times \mathbf{E} \} - \boldsymbol{\Sigma} \{ \mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi} \} - \nabla \cdot \mathbf{E}) \right\}_+ + \\ & + \frac{\mu_0 m}{16} \left\{ \frac{2\varepsilon'^2 + 2\varepsilon' m + m^2}{\varepsilon'^4 (\varepsilon' + m)^2}, \boldsymbol{\pi} \nabla (\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\pi}) \right\}_+ - \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon'} + \mu' \right), \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{H} \right\}_+ \\ & + \frac{\mu'}{4} \left\{ \frac{1}{\varepsilon' (\varepsilon' + m)}, [(\mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\Pi} \cdot \boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\Pi} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{H}) + 2\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{j} + \mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\pi})] \right\}_+, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\mu_0 = e/(2m)$ – дираковский магнитный момент, $\boldsymbol{\pi} = -i\nabla - e\mathbf{A}$ и

$$\varepsilon' = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{\pi}^2}. \quad (4)$$

АММ и ЭДМ тесно связаны между собой, поскольку они определяют действительную и мнимую части одной и той же физической величины [14, 15]. Вклады АММ и ЭДМ в лагранжиан равны [14]

$$L_{AMM} = \frac{\mu'}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad L_{EDM} = -i \frac{d}{2} \sigma^{\mu\nu} \gamma^5 F_{\mu\nu}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где d — ЭДМ частицы, а 0, -1 – соответствующие матрицы 2×2 .

Учет ЭДМ частицы заключается во включении слагаемого, пропорционального d , в уравнение Дирака – Паули. В результате это уравнение приобретает вид

$$[\gamma^\mu \pi_\mu - m + \frac{\mu'}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - i \frac{d}{2} \sigma^{\mu\nu} \gamma^5 F_{\mu\nu}] \Psi = 0. \quad (6)$$

Оператор Гамильтона в представлении Дирака определяется выражением

$$H_D = \beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} + e\Phi + \mu'(-\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{H} + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{E}) - id(-\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{H} + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{E})\gamma^5, \quad (7)$$

где $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ – напряженности электрического и магнитного полей. Здесь и в дальнейшем используются следующие стандартные обозначения:

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \beta\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Pi} = \beta\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}.$$

Оператор Гамильтона (7) приводится к виду

$$H_D = \beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} + e\Phi + \mu'(-\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{H} + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{E}) - d(\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{E} + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{H}). \quad (8)$$

Формула (8) показывает, что слагаемые, описывающие вклады АММ и ЭДМ в гамильтониан, переходят друг в друга при замене

$$\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{E}, \mathbf{E} \rightarrow -\mathbf{H}, \mu' \rightarrow d. \quad (9)$$

Такая же связь между этими слагаемыми имеет место и при классическом описании.

Мы можем апостериори отметить, что для корректного включения ЭДМ в уравнение Дирака – Паули необязательно применять форму записи (5), (6). Более естественная форма записи используется в классической электродинамике [16]. В этом случае взаимодействие ЭДМ с электромагнитным полем описывается с помощью тензора $G^{\mu\nu} = (-\mathbf{H}, -\mathbf{E})$, дуального тензору электромагнитного поля $F^{\mu\nu} = (-\mathbf{E}, \mathbf{H})$. При использовании тензора $G^{\mu\nu}$ для описания ЭДМ обобщенное уравнение Дирака – Паули имеет вид

$$[\gamma^\mu \pi_\mu - m + \frac{\mu'}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{d}{2} \sigma^{\mu\nu} G_{\mu\nu}] \Psi = 0, \quad (10)$$

а лагранжиан L_{EDM} приводится к виду

$$L_{EDM} = -\frac{d}{2} \sigma^{\mu\nu} G_{\mu\nu}. \quad (11)$$

Оператор Гамильтона для частиц с АММ и ЭДМ, рассчитанный с помощью метода, предложенного в работе [3], имеет вид

$$\begin{aligned}
H = & \beta \varepsilon' + e\Phi + \frac{1}{4} \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon' + m} + \mu' \right) \frac{1}{\varepsilon'}, (\Sigma[\pi \times \mathbf{E}] - \Sigma[\mathbf{E} \times \pi] - \nabla \cdot \mathbf{E}) \right\}_+ + \\
& + \frac{\mu_0 m}{16} \left\{ \frac{2\varepsilon'^2 + 2\varepsilon' m + m^2}{\varepsilon'^4 (\varepsilon' + m)^2}, \pi \nabla (\pi \mathbf{E} + \mathbf{E} \pi) \right\}_+ - \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon'} + \mu' \right), \Pi \mathbf{H} \right\}_+ + \\
& + \frac{\mu'}{4} \left\{ \frac{1}{\varepsilon' (\varepsilon' + m)}, [(\mathbf{H} \pi)(\Pi \pi) + (\Pi \pi)(\pi \mathbf{H}) + 2\pi(\pi \mathbf{j} + \mathbf{j} \pi)] \right\}_+ - d\Pi \mathbf{E} + \\
& + \frac{d}{4} \left\{ \frac{1}{\varepsilon' (\varepsilon' + m)}, [(\mathbf{E} \pi)(\Pi \pi) + (\Pi \pi)(\pi \mathbf{E})] \right\}_+ - \frac{d}{4} \left\{ \frac{1}{\varepsilon'}, (\Sigma[\pi \times \mathbf{H}] - \Sigma[\mathbf{H} \times \pi]) \right\}_+. \quad (12)
\end{aligned}$$

Сравнение выражений (3) и (12) показывает, что замена (9) в гамильтониане (3) является допустимой. Несмотря на схожесть описания АММ и ЭДМ, взаимодействие двух моментов с электромагнитным полем имеет принципиальное отличие. В выражении для оператора Гамильтона в представлении ФВ отсутствуют слагаемые, пропорциональные ЭДМ и содержащие первые производные от напряженностей поля. Соответствующие слагаемые, пропорциональные АММ, характеризуют контактное взаимодействие с внешними зарядами и токами. Этот результат, обусловленный отсутствием магнитных зарядов и токов, весьма важен, поскольку упрощает оценку вклада ЭДМ в релятивистское выражение (12) для гамильтониана.

Весьма важным является вопрос о движении спина частиц в электромагнитном поле. Квантово-механическое (операторное) уравнение движения спина релятивистских частиц с АММ и ЭДМ, получаемое с помощью уравнений (1), (12), имеет вид

$$\begin{aligned}
\frac{d\Pi}{dt} = & \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon' + m} + \mu' \right) \frac{1}{\varepsilon'}, [\Pi \times [\mathbf{E} \times \pi]] \right\}_+ + \left\{ \left(\frac{\mu_0 m}{\varepsilon'} + \mu' \right), [\Sigma \times \mathbf{H}] \right\}_+ + \\
& - \frac{\mu'}{2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon' (\varepsilon' + m)}, ([\Sigma \times \pi](\pi \cdot \mathbf{H}) + (\mathbf{H} \cdot \pi)[\Sigma \times \pi]) \right\}_+ + 2d[\Sigma \times \mathbf{E}] + \\
& - \frac{d}{2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon' (\varepsilon' + m)}, ([\Sigma \times \pi](\pi \cdot \mathbf{E}) + (\mathbf{E} \cdot \pi)[\Sigma \times \pi]) \right\}_+ - d \left\{ \frac{1}{\varepsilon'}, [\Pi \times [\mathbf{H} \times \pi]] \right\}_+. \quad (13)
\end{aligned}$$

Таким образом, проведение преобразования ФВ позволяет найти оператор Гамильтона и квантово-механическое уравнение движения спина релятивистских частиц с АММ и ЭДМ.

3. Общие уравнения движения частицы и спина

Траектория движения частиц в накопительных кольцах, имеющих форму круга, приблизительно является окружностью. Когерентные бетатронные колебания (КБК) пучка как целого в горизонтальной и вертикальной плоскостях изменяют траектории отдельных частиц. При использовании радиочастотных резонаторов происходят также когерентные вынужденные колебания. Некогерент-

ное движение частиц также может иметь место. В результате траектории частиц не замкнуты, а дефекты полей обуславливают их дисторсии. По этим причинам движение спина становится весьма сложным.

Как правило, для описания движения частиц и их спина достаточно использовать одночастичное приближение. В этом приближении когерентные и некогерентные бетатронные колебания приводят к аналогичным эффектам.

Движение частиц определяется уравнением Лоренца:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e(\mathbf{E} + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}), \quad \boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{v}}{c} = \frac{\mathbf{p}}{\gamma m}. \quad (14)$$

Удобно использовать единичный вектор направления импульса $\mathbf{N} = \mathbf{p}/p$. Поскольку

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \frac{\dot{\mathbf{p}}}{p} - \frac{\mathbf{p}}{p^3}(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{p}}),$$

уравнение (14) приобретает вид

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{N}, \quad \boldsymbol{\omega} = -\frac{e}{\gamma m} \left(\mathbf{B} - \frac{\mathbf{N} \times \mathbf{E}}{\beta} \right), \quad (15)$$

где $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость вращения частиц.

Движение спина без учета ЭДМ описывается уравнением Томаса – Баргманна – Мишеля – Телегди (Т-БМТ):

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\Omega}_{T-BMT} \times \mathbf{S}, \quad (16)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{T-BMT} = -\frac{e}{2m} \left\{ \left(g - 2 + \frac{2}{\gamma} \right) \mathbf{B} - \frac{(g-2)\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{B}) - \left(g - 2 + \frac{2}{\gamma+1} \right) (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}) \right\},$$

где $\mathbf{S}$ – вектор спина. Это уравнение было выведено Томасом [17] (также Френкелем [18]) и в более общей форме – Баргманном, Мишелем и Телегди [19].

Сравнение уравнений (15) и (16) показывает, что спин частицы, помещенной в магнитное поле, вращается в горизонтальной плоскости по отношению к ее импульсу с частотой, пропорциональной $g-2$.

Переход от квантово-механического уравнения движения спина к квазиклассическому приближению описан в работе [3]. Вводя фактор $\eta = 4dm/e$, из уравнения (13) находим квазиклассическое уравнение движения спина:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = (\boldsymbol{\Omega}_{BMT} + \boldsymbol{\Omega}_{EDM}) \times \mathbf{S},$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{BMT} = -\frac{e}{2m} \left\{ \left(g - 2 + \frac{2}{\gamma} \right) \mathbf{H} - \frac{(g-2)\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{H}) - \left(g - 2 + \frac{2}{\gamma+1} \right) [\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}] \right\}, \quad (17)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{EDM} = -\frac{e\eta}{2m} \left(\mathbf{E} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}) + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{H} \right),$$

где $\Omega_{БМТ}$ определяется уравнением Т-БМТ [19]. Уравнение (17) совпадает с соответствующим классическим уравнением [10]. В общем случае указанный фактор равен $\eta = \frac{2dm}{eS}$, где S – спиновое квантовое число.

Электрический дипольный момент оказывает пренебрежимо малое влияние на движение частиц, но влияет на движение спина. Характер движения спина, обусловленного взаимодействием электрического и магнитного дипольных моментов с внешним полем, существенно различается. Это обстоятельство позволяет проводить эксперименты по измерению ЭДМ в накопительных кольцах методом «замораживания» спина [7]. Поворот спина относительно вектора импульса в горизонтальной плоскости можно устранить с помощью радиального электрического поля с напряженностью

$$\mathbf{E} = \frac{a\gamma^2}{1-a\beta^2\gamma^2} [\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{H}], \quad a = \frac{g-2}{2}.$$

В этом случае вклад ЭДМ в движение спина характеризуется угловой скоростью:

$$\Omega_{EDM} = -\frac{e\eta}{2m} \cdot \frac{1+a}{1-a\beta^2\gamma^2} [\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{H}]. \quad (18)$$

Различие в знаках с работой [7] объясняется тем, что в этой работе вектор угловой скорости был определен с противоположным знаком.

4. Поправки к угловой скорости движения частицы в горизонтальной плоскости

Движение спина частиц в накопительных кольцах обычно определяется по отношению к траектории частиц. Использование цилиндрических координат существенно упрощает анализ $g-2$ -прецессии и эффектов, обусловленных наличием у частицы ЭДМ. Когда конфигурация основных полей достаточно проста, уравнения движения частицы и спина в цилиндрических координатах приобретают достаточно простой вид. Следует учитывать, что оси цилиндрической системы координат определяются положением частицы, которая не только движется поступательно, но и в общем случае участвует в колебаниях по трем осям. Трансформация уравнения Т-БМТ к цилиндрической системе координат должна производиться с учетом поправок на колебания в уравнении движения частицы.

Вертикальные когерентные бетатронные колебания пучка и дисторсии орбиты изменяют плоскость движения частицы. (Псевдо) вектор угловой скорости и мгновенная плоскость движения частицы (мгновенная плоскость вращения вектора $\mathbf{N}$) не совпадают с горизонтальной плоскостью. Угол Φ между двумя положениями вращающегося вектора $\mathbf{N}$ в повернутой на некоторый угол мгновенной плоскости движения частицы не равен углу ϕ между двумя соответствующими горизонтальными проекциями. Следовательно, вертикальные КБК и дисторсии орбиты изменяют мгновенную угловую скорость движения частицы. Этот эффект может быть рассчитан.

Мы полагаем, что оси x и y горизонтальны, а ось z – вертикальна. В ци-

линдрической системе координат удобно направить ось z ортогонально плоскости невозмущенного движения частицы. Мы можем определить угол вращения частицы в плоскости xy как угол между двумя горизонтальными проекциями единичного вектора направления импульса, $\mathbf{N}_{||}$ и $\mathbf{N}'_{||}$. Бесконечно малый угол вращения частицы в плоскости xy , $d\phi$ равен

$$d\phi = \frac{(\mathbf{N}_{||} \times \mathbf{N}'_{||}) \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{N}_{||}| \cdot |\mathbf{N}'_{||}|} = \frac{(\mathbf{N}_{||} \times d\mathbf{N}_{||}) \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{N}_{||}|^2},$$

где $d\mathbf{N}_{||} = \mathbf{N}'_{||} - \mathbf{N}_{||}$ и $d\mathbf{N}_{||}$ характеризует бесконечно малый угол поворота вектора $\mathbf{N}_{||}$. Символ $||$ означает горизонтальную проекцию любого вектора. Величина $d\mathbf{N}_{||}$ определяет отклонение импульса частицы за время dt . Мгновенная угловая скорость вращения частицы в горизонтальной плоскости определяется выражением

$$\dot{\phi} \equiv \frac{d\phi}{dt} = \frac{(\mathbf{N}_{||} \times \dot{\mathbf{N}}_{||}) \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{N}_{||}|^2} = \omega_z - o, \quad (19)$$

где

$$o = \frac{(\omega_x N_x + \omega_y N_y) N_z}{1 - N_z^2} = \frac{(\omega_\rho N_\rho + \omega_\phi N_\phi) N_z}{1 - N_z^2}. \quad (20)$$

Компоненты вектора $\boldsymbol{\omega}$ определяются уравнением (15). Индексы ρ и ϕ означают проекции на базисные векторы $\mathbf{e}_\rho$ и $\mathbf{e}_\phi$ цилиндрической системы координат.

Уравнения (19) и (20) являются точными. Справедливость этих уравнений может быть подтверждена тем, что они точно описывают поворот плоскости орбиты на постоянный угол. Затем можно оценить величину o в экспериментальных условиях, когда угол поворота плоскости орбиты частиц осциллирует.

Если орбита частиц идеально горизонтальна, направление импульса определяется формулами:

$$N_x = -\sin(\omega_0 t + \varphi_0), \quad N_y = \cos(\omega_0 t + \varphi_0), \quad N_z = 0,$$

где ω_0 – циклотронная частота и φ_0 – произвольная фаза. Если нормаль к отклоненной орбите частиц ортогональна оси y и отклонена от оси z на постоянный угол θ , y -компоненты всех векторов не меняются, и компоненты векторов $\boldsymbol{\omega}$ и $\mathbf{N}$ равны:

$$\begin{aligned} \omega_x &= \omega_0 \sin \theta, \quad \omega_y = 0, \quad \omega_z = \omega_0 \cos \theta, \\ N_x &= -\cos \theta \sin(\omega_0 t + \varphi_0), \quad N_y = \cos(\omega_0 t + \varphi_0), \quad N_z = \sin \theta \sin(\omega_0 t + \varphi_0). \end{aligned} \quad (21)$$

В этом случае уравнение (1) принимает вид

$$\dot{\phi} = \frac{\omega_0 \cos \theta}{1 - \sin^2 \theta \sin^2 (\omega_0 t + \varphi_0)}. \quad (22)$$

После интегрирования и усреднения по времени мы находим: $\langle \dot{\phi} \rangle = \omega_0$. Этот результат согласуется с очевидным фактом, что усредненные частоты движения частицы в отклоненной и горизонтальной плоскостях равны, и, следовательно, подтверждает справедливость уравнений (19),(20).

Для оценки величины ϕ в реальных условиях эксперимента можно ограничиться учетом только возмущений траектории частицы, обусловленных радиальными и вертикальными КБК. Синхротронное движение не влияет на эту величину. Оценки показывают, что радиальное и вертикальное бетатронное движение можно описать простыми формулами:

$$N_\rho = \frac{p_\rho}{p} = \rho_0 \sin(\omega_r t + \alpha),$$

$$N_z = \frac{p_z}{p} = \psi_0 \sin(\omega_v t + \delta),$$

где ρ_0 и ψ_0 – угловые амплитуды, ω_r и ω_v – угловые частоты радиальных и вертикальных КБК соответственно.

С учетом порядков величин

$$\omega_\rho \sim \psi_0 \omega_v, \quad \omega_\phi \sim \rho_0 \psi_0 \omega_v, \quad N_\rho \sim \rho_0, \quad N_\phi \approx \pm 1, \quad N_z \sim \psi_0 \quad (23)$$

мы получаем, что величина ϕ – третьего порядка по угловым амплитудам ρ_0 и ψ_0 . Более того, она осциллирует и, следовательно, в результате усреднения обращается в ноль. Если мы учитываем только слагаемые второго порядка по угловым амплитудам и средняя орбита частиц не отклонена, величина ϕ пренебрежимо мала. Приближенно

$$\dot{\phi} = \omega_z = -\frac{e}{\gamma m} \left(B_z - \frac{(\mathbf{N} \times \mathbf{E})_z}{\beta} \right). \quad (24)$$

5. Уравнение движения спина в цилиндрических координатах

Чтобы трансформировать общее уравнение движения спина (17) к цилиндрическим координатам, необходимо найти величины

$$\frac{dS_\rho}{dt}, \quad \frac{dS_\phi}{dt}, \quad \text{и} \quad \frac{dS_z}{dt}.$$

Из геометрии проблемы следует, что горизонтальные оси $\mathbf{e}_\rho$ и $\mathbf{e}_\phi$ вращаются с мгновенной угловой скоростью

$$\boldsymbol{\omega}' = \dot{\phi} \mathbf{e}_z.$$

Легко показать с помощью простого преобразования, что движение спина по отношению к осям цилиндрической системы координат может быть записано в виде:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\omega}_a \times \mathbf{S}, \quad \boldsymbol{\omega}_a = \boldsymbol{\Omega} - \dot{\phi} \mathbf{e}_z. \quad (25)$$

В этом уравнении $\boldsymbol{\omega}_a$ – угловая скорость вращения спина в цилиндрических координатах. Соответствующая угловая скорость в декартовых координатах, равная $\boldsymbol{\Omega}$, определяется уравнением (17). Различие между величинами $\boldsymbol{\omega}_a$ и $\boldsymbol{\Omega}$ обусловлено вращением осей $\mathbf{e}_\rho$ и $\mathbf{e}_\varphi$.

ЭДМ влияет на движение частицы, только если электрическое поле неоднородно. Однако поправка к уравнению движения частицы и в этом случае пренебрежимо мала. Если радиочастотные резонаторы не используются, можно также пренебречь слагаемым $\frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E})$.

В уравнении (25)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}_a = & -\frac{e}{m} \left\{ a\mathbf{B} - \frac{a\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{B}) + \left(\frac{1}{\gamma^2-1} - a \right) (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\gamma} \left[\mathbf{B}_\parallel - \frac{1}{\beta^2} (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E})_\parallel \right] + \frac{\eta}{2} \left(\mathbf{E} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}) + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B} \right) \right\} + o\mathbf{e}_z. \end{aligned} \quad (26)$$

Эта формула является точной, и $\boldsymbol{\omega}_a$ – это угловая частота прецессии спина. Уравнения (25), (26) описывают движение спина в произвольных накопительных кольцах с учетом ЭДМ частиц. Слагаемое $o\mathbf{e}_z$ в формуле (26) для ЭДМ- и $g-2$ -экспериментов пренебрежимо мало. При измерениях ЭДМ в рамках $g-2$ -эксперимента выполнялось условие $1/(\gamma^2-1) = a$, т. е. $\gamma = 29.3$. В этом случае третье слагаемое в уравнении (26) равно нулю [5, 6].

После пренебрежения малыми слагаемыми уравнение для угловой скорости $g-2$ -прецессии, учитывающее наличие ЭДМ, приобретает вид

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}_a = & -\frac{e}{m} \left\{ a\mathbf{B} - \frac{a\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{B}) + \left(\frac{1}{\gamma^2-1} - a \right) (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\gamma} \left[\mathbf{B}_\parallel - \frac{1}{\beta^2} (\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E})_\parallel \right] + \frac{\eta}{2} (\mathbf{E} + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}) \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Формулы (26), (27) могут быть использованы для аналитических вычислений динамики спина в цилиндрических координатах с учетом дисторсий полей и осцилляций пучка.

6. Усреднение угловой скорости вращения спина

Динамика спина, определяемая формулой (26), достаточно проста, когда вертикальная проекция вектора спина увеличивается виток за витком. Такое поведение спина имеет место в планируемом ЭДМ-эксперименте. Однако в $g-2$ -эксперименте необходимо определять усредненные и интегральные характеристики движения спина в горизонтальной плоскости [5, 6]. Мгновенная угловая скорость вращения спина в горизонтальной плоскости $\dot{\psi}$ характеризуется

изменением угла ψ , определяющего ориентацию спина в этой плоскости. Величина $\dot{\psi}$ может быть найдена аналогично соответствующей величине $\dot{\phi}$, определяющей вращение частицы и определяемой формулами (19), (20). Она описывается уравнением

$$\dot{\psi} \equiv \frac{d\psi}{dt} = \frac{(\mathbf{P}_{\parallel} \times \dot{\mathbf{P}}_{\parallel}) \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{P}_{\parallel}|^2} = (\omega_a)_z - O, \quad (28)$$

где

$$O = \frac{[(\omega_a)_x \xi_x + (\omega_a)_y \xi_y] \xi_z}{1 - \xi_z^2} = \frac{[(\omega_a)_{\rho} \xi_{\rho} + (\omega_a)_{\phi} \xi_{\phi}] \xi_z}{1 - \xi_z^2} \quad (29)$$

и $\mathbf{P} = \mathbf{S}/S$ – вектор поляризации.

7. Поля, обуславливающие рост вертикальной поляризации

В резонансном ЭДМ-эксперименте [11, 12, 13] планируется стимулировать РВП, обусловленный ЭДМ, и избежать аналогичного эффекта, вызванного магнитным моментом. Известно, что магнитный резонанс имеет место, когда частица, помещенная в однородное вертикальное магнитное поле, также подвергается воздействию горизонтального магнитного поля, осциллирующего с частотой, близкой к частоте прецессии спина (см., например, [20]). При движении частицы магнитный резонанс может быть также вызван осциллирующим электрическим полем, трансформирующимся в осциллирующее магнитное поле в системе покоя частицы. Результатом наличия магнитного резонанса является переворот спина для вертикально поляризованного и РВП – для горизонтально поляризованного пучка.

Очевидно, магнитный резонанс не может иметь места, когда электрическое поле продольно, поскольку только продольное электрическое поле появляется в системе покоя частицы. Поскольку частоты бетатронных колебаний выбираются далекими от резонанса, эти колебания не могут приводить к резонансному эффекту. Однако резонанс имеет место, когда частица обладает ЭДМ. Вектор ЭДМ определяется выражением $\mathbf{d} = d\mathbf{S}/S$. Резонанс является «электрическим», поскольку он обусловлен электрическим полем в системе покоя частицы. В этой системе электрическое поле имеет продольную компоненту E'_{ϕ} , определяемую осциллирующим электрическим полем, и радиальную компоненту E'_{ρ} , обусловленную преобразованием Лоренца вертикального магнитного поля. Последняя компонента имеет резонансную часть вследствие модуляции скорости частицы. Только эта компонента учитывалась в предыдущих расчетах [11, 12, 13]. Резонансный эффект обеспечивается обеими компонентами электрического поля в системе покоя частицы.

Мы используем систему покоя частицы для объяснения причины возникновения резонанса. Однако мы не используем ее для расчетов и выводим все базовые уравнения в цилиндрической системе координат. Движение спина частиц в

накопительных кольцах обычно определяется по отношению к траектории частицы. Основные поля, как правило, заданы относительно осей цилиндрической системы координат. Когда накопительное кольцо или имеет форму круга, или разделено на круговые секторы пустыми промежутками, использование цилиндрических координат упрощает анализ спиновых эффектов. Уравнение движения спина в цилиндрической системе координат совпадает с соответствующим уравнением в системе, вращающейся вместе с частицей (вращающаяся система отсчета), поскольку горизонтальные оси цилиндрической системы координат вращаются с мгновенной угловой частотой вращения частицы в накопительном кольце. Движение частиц во вращающейся системе отсчета является сравнительно медленным, поскольку оно может быть обусловлено только осцилляциями и другими отклонениями частиц от идеальной траектории. Следовательно, различиями между движением спина в цилиндрической системе координат и в системе покоя частицы во многих случаях можно пренебречь.

Общее уравнение движения спина в цилиндрической системе координат имеет вид (19). Хотя поля, определяющие возмущения траектории частиц, существенно влияют на движение спина, величиной ω , зависящей от радиальной и вертикальной компонент импульса частицы, характеризующих эти возмущения, в рассматриваемом случае можно пренебречь.

Для создания резонанса должны быть использованы радиочастотные резонаторы. Электрическое поле в резонаторе генерируется вдоль центральной линии, а магнитное поле направлено перпендикулярно [21]. Магнитное поле вдоль центральной линии равно нулю. Если резонаторы идеально размещены и ориентированы в продольном направлении, магнитное поле не может привести к какому-либо резонансному эффекту. Резонансный эффект, ведущий к РВП, обусловлен слагаемыми, пропорциональными η . Следовательно, наблюдаемый РВП соответствует определенному значению ЭДМ. Однако как смещение, так и угловое отклонение центральной линии радиочастотного резонатора от усредненной траектории частиц приводит к аналогичному поведению спина, имитирующему наличие ЭДМ. В результате они создают систематические ошибки измерения ЭДМ. Однако, как правило, вызванное этими систематическими ошибками движение спина находится не в резонансе с прецессией спина в горизонтальной плоскости. Поэтому наличие систематических ошибок создает шум и приводит к быстрым осцилляциям вертикальной компоненты вектора поляризации [11, 12, 13, 22]. Помимо этих эффектов, систематическая ошибка может создаваться радиальным магнитным полем в системе покоя частицы, осциллирующим с резонансной частотой. В эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона аналогичная ошибка будет устраняться путем попеременного создания двух пучков с различными частотами бетатронных колебаний [11, 13, 22]. В настоящей работе мы рассчитываем только эффекты, создаваемые резонансными полями в идеальных условиях, и не рассматриваем систематические ошибки.

Поскольку скорость осциллирует, вертикальное магнитное поле создает резонансную часть радиального электрического поля в системе покоя частицы. Таким образом, мы рассматриваем постоянное вертикальное магнитное и осциллирующее продольное электрическое поля в лабораторной системе отсчета. Это

согласуется с уравнением (27). Резонансные слагаемые в выражении для угловой скорости вращения спина пропорциональны ЭДМ:

$$\mathbf{\Omega}_{EDM} = -\frac{e\eta}{2m} \left[\mathbf{E} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}) + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B} \right]. \quad (30)$$

Поляризация циркулирующего пучка дейтронов может быть измерена путем столкновений дейтронов с углеродной мишенью и наблюдения продуктов реакций, генерируемых ядерными взаимодействиями [8, 23]. Поляризация циркулирующего пучка протонов может быть определена путем упругого протон-протонного рассеяния (см. [23, 24] и цитированную там литературу).

8. Резонансные напряженности в эксперименте по поиску электрических дипольных моментов

В эксперименте по поиску электрического дипольного момента дейтрона угловая частота вынужденных продольных колебаний ω должна быть очень близкой к угловой частоте вращения спина ($g-2$ -частоте) ω_0 и близка к собственной частоте свободных синхротронных колебаний (синхротронной частоте) [13]. Величина ω_0 почти равна вертикальной компоненте ω_a , поскольку другие компоненты этого (псевдо)вектора относительно малы:

$$\omega_0 = (\omega_a)_z = -\frac{ea}{m} B_0. \quad (31)$$

В уравнении (31) B_0 – усредненное вертикальное магнитное поле. Мы полагаем, что заряд частицы положителен и магнитное поле направлено вверх ($B_0 > 0$). Циклотронная частота определяется формулой

$$\omega_c = -\frac{eB_0}{\gamma_0 m}, \quad (32)$$

где γ_0 – усредненный лоренц-фактор. Знак минус означает, что частица вращается по часовой стрелке ($\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{e}_\phi < 0$, $\omega_c < 0$).

Поскольку осциллирующее электрическое поле направлено продольно,

$$\mathbf{E} - \frac{\gamma}{\gamma+1} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}) = \frac{1}{\gamma} \mathbf{E}. \quad (33)$$

Если мы рассматриваем только поля, определяющие электрическое поле в системе покоя частицы, движение спина в горизонтальной плоскости описывается уравнением (30), где $\boldsymbol{\beta} = -\beta \mathbf{e}_\phi$.

Действие резонансных электрического и квазиэлектрического ($\mathbf{G} \equiv \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}$) полей на ЭДМ аналогично действию резонансных магнитного и квазимагнитного ($-\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}$) полей на магнитный момент. Следовательно, ранее полученные выражения для резонансных напряженностей (см. [25, 26, 27] и цитированную там литературу) могут быть использованы при анализе взаимодействий, зависящих

от ЭДМ. Для ЭДМ-эксперимента возможными являются два режима с большими когерентными осцилляциями: строго линейный (использующий, например, специально созданный радиочастотный резонатор для линеаризации колебаний) и сильно нелинейный с хорошо стабилизированными когерентными колебаниями (см. [13] и цитированную там литературу). Мы ограничиваемся рассмотрением линейных колебаний.

Удобно использовать величину

$$\Phi = \phi(t) - \phi(0) = \omega_c t,$$

где ϕ – азимут, характеризующий расположение частицы в заданный момент времени. Дистанция, проходимая частицей, равна

$$L_b = \frac{\beta c}{\omega_c} \Phi = \beta c t.$$

Подобно магнитным полям радиочастотных диполя и соленоида [25, 26, 27], продольное магнитное поле в резонаторе (радиочастотной полости) может быть выражено через дельта-функции:

$$\mathbf{E} = E_0 \frac{L(\Phi)}{\rho} \sin(\omega t + \varphi) \mathbf{e}_\varphi, \quad L(\Phi) = l \sum_{N=-\infty}^{\infty} \delta(\Phi - \Phi_0 - 2\pi N), \quad \rho = -\frac{\beta c}{\omega_c}, \quad (34)$$

где E_0, ω и φ – это амплитуда, угловая частота и фаза электрического поля, действующего на частицу, l – длина резонатора, азимут Φ_0 определяет угловое расположение резонатора и ρ – радиус кривизны. Уравнение (30) выражает взаимодействие ЭДМ с электрическим полем во вращающейся системе отсчета через поля в лабораторной системе. Поскольку угловая частота ω характеризует колебания электрического поля не в фиксированной точке, а в точке расположения движущейся с релятивистской скоростью частицы, величина ω не совпадает с угловой частотой резонатора.

Уравнение движения частицы

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} \quad (35)$$

определяет осциллирующую часть импульса:

$$\mathbf{p} = -[p_0 + \Delta p_0 \cos(\omega t + \varphi)] \mathbf{e}_\varphi, \quad \Delta p_0 = \frac{eE_0 L(\Phi)}{\omega \rho}. \quad (36)$$

Уравнение (36) позволяет найти кусочно-постоянный импульс в дугах накопительного кольца.

Мы можем произвести вычисления с учетом членов первого порядка по $\Delta\beta_0$ и пренебречь колебаниями пучка на нерезонансных частотах. В этом случае нормализованная скорость определяется выражением:

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{m^2 + p^2}} = -[\beta_0 + \Delta\beta_0 \cos(\omega t + \varphi)] \mathbf{e}_\varphi, \quad (37)$$

где

$$\beta_0 = \frac{p_0}{m\gamma_0}, \quad \gamma_0 = \frac{\sqrt{m^2 + p_0^2}}{m}, \quad \Delta\beta_0 = \frac{\Delta p_0}{m\gamma_0^3} = \frac{eE_0 L(\Phi)}{m\gamma_0^3 \omega \rho}. \quad (38)$$

Уравнения (27), (30) – (38) приводят к следующей зависимости:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{d\Phi} &= \mathbf{F} \times \mathbf{S}, \quad \mathbf{F} = F_1 \mathbf{e}_\rho + F_2 \mathbf{e}_\varphi + F_3 \mathbf{e}_z \\ &= \frac{e\eta}{2p_0} E_0 L(\Phi) \left[\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} \cos(\nu\Phi + \varphi) \mathbf{e}_\rho + \sin(\nu\Phi + \varphi) \mathbf{e}_\varphi \right] + a\gamma_0 \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (39)$$

где $F_3 = a\gamma_0$ – нормализованная частота прецессии спина и $\nu = \omega/\omega_c$.

Удобно использовать метод резонансных напряженностей, базирующийся на разложении в ряд Фурье [4, 28, 29]:

$$F_1 - iF_2 = \sum_{K=-\infty}^{\infty} \varepsilon_K e^{-i\nu_K \Phi}, \quad \nu_K = \omega_K/\omega_c. \quad (40)$$

В этом уравнении резонансные напряженности ε_K – это амплитуды Фурье, соответствующие нормализованным резонансным частотам ν_K , а ω_K – это частоты гармоник. В рассматриваемом случае [4, 25]

$$\nu_K = K \pm \nu, \quad K = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (41)$$

Резонансные напряженности определяются уравнением:

$$\varepsilon_K = \frac{1}{2\pi N} \int_{(N)} (F_1 - iF_2) e^{i\nu_K \Phi} d\Phi, \quad (42)$$

где интегрирование должно производиться по бесконечному числу витков $N \rightarrow \infty$.

Уравнения (34), (39), (41), (42) приводят к следующему выражению для резонансных напряженностей:

$$\begin{aligned} \varepsilon_K^+ &= \frac{e\eta}{8\pi p_0} E_0 l \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} + 1 \right) e^{i(K\Phi_0 - \varphi)}, \\ \varepsilon_K^- &= \frac{e\eta}{8\pi p_0} E_0 l \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} - 1 \right) e^{i(K\Phi_0 + \varphi)}, \end{aligned} \quad (43)$$

где ε_K^+ и ε_K^- соответствуют знакам плюс и минус в уравнении (41). Естественно, зависимость от K в показателях экспонент может быть устранена соответствующим выбором начальной фазы ($\Phi_0 = 0$).

Уравнение (43) может быть также выведено путем разложения дельта-функций в ряд Фурье [27]:

$$\sin(\nu\Phi + \varphi) \sum_{N=-\infty}^{\infty} \delta(\Phi - \Phi_0 - 2\pi N) = \frac{1}{2\pi} \sum_{N=-\infty}^{\infty} \sin[\pm N(\Phi - \Phi_0) + \nu\Phi + \varphi],$$

$$\cos(\nu\Phi + \varphi) \sum_{N=-\infty}^{\infty} \delta(\Phi - \Phi_0 - 2\pi N) = \frac{1}{2\pi} \sum_{N=-\infty}^{\infty} \cos[\pm N(\Phi - \Phi_0) + \nu\Phi + \varphi]. \quad (44)$$

Уравнения (39) и (43) определяют соотношение между величинами F_1, F_2 и резонансными напряженностями, которое согласуется с аналогичными соотношениями, выведенными в [25, 26, 27] для локализованных радиочастотных магнитных полей. Такое согласие является важным, поскольку результаты, полученные в [25, 26], были поставлены под сомнение в [30, 31, 32].

Основное различие между уравнением (43) и соответствующими уравнениями для резонансных напряженностей, выведенными в [25, 26, 27], состоит в несовпадении выражений для ε_K^+ и ε_K^- . Это несовпадение обусловлено более сложным видом вектора прецессии спина $\mathbf{F}$ в исследуемом случае. Уравнение (39) показывает, что этот вектор имеет ненулевые компоненты по двум горизонтальным осям, различающиеся по фазе на $\pi/2$.

Подстановка ε_K в уравнение (40) приводит к соотношению

$$\begin{aligned} Q = F_1 - iF_2 &= \sum_{K=-\infty}^{\infty} [\varepsilon_K^+ e^{-i(K+\nu)\Phi} + \varepsilon_K^- e^{-i(K-\nu)\Phi}] = \\ &= \frac{e\eta}{8\pi p_0} E_0 l \sum_{K=-\infty}^{\infty} \left\{ \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} + 1 \right) e^{-i[K(\Phi - \Phi_0) + \nu\Phi + \varphi]} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} - 1 \right) e^{-i[K(\Phi - \Phi_0) - \nu\Phi - \varphi]} \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

Поскольку F_1 и F_2 – действительные величины, они определяются формулами

$$F_1 = \text{Re}(Q), \quad F_2 = -\text{Im}(Q). \quad (46)$$

В результате уравнение (39) приобретает вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{d\Phi} &= [\text{Re}(Q)\mathbf{e}_\rho - \text{Im}(Q)\mathbf{e}_\varphi + a\gamma_0\mathbf{e}_z] \times \mathbf{S} = \\ &= \left(\sum_{K=-\infty}^{\infty} \left\{ \text{Re}[\varepsilon_K^+ e^{-i(K+\nu)\Phi} + \varepsilon_K^- e^{-i(K-\nu)\Phi}] \mathbf{e}_\rho - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{Im}[\varepsilon_K^+ e^{-i(K+\nu)\Phi} + \varepsilon_K^- e^{-i(K-\nu)\Phi}] \mathbf{e}_\varphi \right\} + a\gamma_0\mathbf{e}_z \right) \times \mathbf{S}. \end{aligned} \quad (47)$$

Уравнения (43) и (47) полностью определяют динамику спина в эксперименте по поиску ЭДМ.

Модуляция скорости, определяемая уравнениями (37), (38), может быть выражена через резонансные напряженности. Использование разложения Фурье (44) приводит уравнение (37) к следующему виду:

$$\boldsymbol{\beta} = - \left\{ \beta_0 + \Delta\beta_m \sum_{K=-\infty}^{\infty} \cos[\pm K(\Phi - \Phi_0) + \nu\Phi + \varphi] \right\} \mathbf{e}_\varphi, \quad (48)$$

где амплитуда модуляции скорости имеет вид

$$\Delta\beta_m = -\frac{e\omega_0}{2\pi a\gamma_0^3 p_0 \omega} E_0 l. \quad (49)$$

Уравнения (43), (48), (49) приводят к формуле

$$\beta = \left\{ -\beta_0 + \frac{2}{\eta\gamma_0} \left[\left(1 + \frac{a\gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right)^{-1} \sum_{K=-\infty}^{\infty} \varepsilon_K^+ e^{-i(K+\nu)\Phi} + \left(1 - \frac{a\gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right)^{-1} \sum_{K=-\infty}^{\infty} \varepsilon_K^- e^{-i(K-\nu)\Phi} \right] \right\} \mathbf{e}_\Phi. \quad (50)$$

Зависимость между резонансными напряжениями и амплитудой модуляции скорости имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_K^+ &= -\frac{\eta\gamma_0}{4} \left(1 + \frac{a\gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right) \Delta\beta_m e^{i(K\Phi_0 - \varphi)}, \\ \varepsilon_K^- &= -\frac{\eta\gamma_0}{4} \left(1 - \frac{a\gamma_0^2 \omega}{\omega_0} \right) \Delta\beta_m e^{i(K\Phi_0 + \varphi)}. \end{aligned} \quad (51)$$

9. Эффекты, обусловленные резонансными электрическим и магнитным полями

Спин вращается против часовой стрелки (по часовой стрелке), если ω_0 положительно (отрицательно). Резонансное поле должно вращаться в том же направлении, и его частота должна быть очень близка к частоте вращения спина ($\omega_0 \approx \omega_c \nu_R$ и $a\gamma_0 \approx \nu_R$, где индекс $K = R$ определяет резонанс). Влияние нерезонансных гармоник и полей, вращающихся в противоположном направлении, обращается в нуль в среднем [4, 20]. Следовательно, уравнение (47) содержит нерезонансные члены, которые должны быть устранены. Результирующее уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{d\Phi} &= \mathbf{F} \times \mathbf{S}, \quad \mathbf{F} = \text{Re} \left[\varepsilon_R^\pm e^{-i(R \pm \nu)\Phi} \right] \mathbf{e}_\rho - \text{Im} \left[\varepsilon_R^\pm e^{-i(R \pm \nu)\Phi} \right] \mathbf{e}_\varphi + a\gamma_0 \mathbf{e}_z = \\ &= \frac{e\eta}{8\pi p_0} E_0 l \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} \pm 1 \right) \mathbf{e}_\parallel + a\gamma_0 \mathbf{e}_z, \\ \mathbf{e}_\parallel &= \cos(\Psi) \mathbf{e}_\rho + \sin(\Psi) \mathbf{e}_\varphi, \quad \Psi = R(\Phi - \Phi_0) \pm (\nu\Phi + \varphi), \end{aligned} \quad (52)$$

где $\mathbf{e}_\parallel$ — единичный вектор, вращающийся в горизонтальной плоскости с нормализованной угловой частотой $\nu_R = R \pm \nu$.

Первое и второе слагаемые в множителе $\left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} \pm 1 \right)$ обусловлены магнитным и электрическим полями соответственно. Влияние электрического поля характеризуется отношениями вкладов электрического и магнитного полей:

$$k = \frac{a\gamma_0^2\omega}{\omega_0}. \quad (53)$$

Амплитуда резонансного квазиэлектрического поля равна

$$G_0 = \frac{E_0}{k\gamma_0}. \quad (54)$$

Уравнения (52) – (54) справедливы при любом соотношении между величинами ω_0 и ω .

Отношение (53) имеет существенно различные значения для протона и дейтрона. Гиромагнитная аномалия для протона приблизительно в 12.5 раза больше, чем для дейтрона. К тому же для дейтрона гиромагнитная аномалия отрицательна. Резонанс на частоте $\omega \approx \omega_0 = a\gamma_0\omega_c$ является доминирующей гармоникой для дейтрона. Для этой гармоники $R = 0$. В планируемом эксперименте по поиску электрического дипольного момента дейтрона величина k равна $k_d = -0.234$, $p_0 = 1.5$ ГэВ/с ($\gamma_0 = 1.28$). Поправка, обусловленная электрическим полем, существенна, поскольку она приводит к возрастанию эффекта, обусловленного ЭДМ, на 23 % для дейтрона. Хотя вклад магнитного поля в эффект РВП является доминирующим, учет данной поправки необходим.

Для протона величины $a_p = 1.7928$ и $a_p\gamma_0$ близки к 2 и угловая частота $\omega = \omega_0$, соответствующая гармонике $R = 0$, слишком велика [33]. Поэтому удобнее модулировать скорость протона с другой угловой частотой [33] $\omega \approx \omega_0 - 2\omega_c$, которая соответствует нормализованной резонансной частоте $\nu_R = 2 + \nu$ (величина ν положительна, а ω – отрицательна).

Можно выбрать кинетическую энергию протонов, равной $T = 161$ МэВ [33]. Этот выбор дает $\gamma_0 = 1.172$, $\nu = 0.1005$, $\omega/\omega_0 = \nu/(a\gamma_0) = 0.0478$. Отношение (53) равно $k_p = 0.118$. Учет поправки на электрическое поле приводит к увеличению эффекта, обусловленного ЭДМ, на 12 %. Хотя вклад магнитного поля в этот эффект является доминирующим, поправка на электрическое поле весьма важна и должна учитываться при расчете эффекта.

10. Резонансная динамика спина

Для расчета резонансной динамики спина может быть использована теория магнитного резонанса [20]. На спин действуют вертикальное магнитное поле, которое вращает его в горизонтальной плоскости, и резонансные электрическое и квазиэлектрическое поля. Другие поля с нормализованными резонансными частотами ν_K , которые далеки от нормализованной частоты вращения спина $a\gamma_0$, могут не рассматриваться. Резонансная динамика спина определяется уравнением (52), и вектор $\mathbf{e}_\parallel$ вращается с нормализованной частотой $\nu_R \approx a\gamma_0$.

Для описания динамики спина удобно использовать систему отсчета, вращающуюся с угловой частотой $\omega_R = \omega_c\nu_R$ [20] по отношению к осям цилиндри-

ческой системы координат. В этой системе отсчета вертикальная компонента угловой скорости вращения спина значительно меньше, чем в цилиндрической системе координат. В лабораторной системе вектор $\mathbf{e}_{\parallel}$ вращается с угловой частотой, которая существенно отличается от ω вследствие вращения осей цилиндрической системы координат в этой системе.

Если радиальное и продольное направления в системе отсчета, сопровождающей спин, совпадают с такими же направлениями в цилиндрической системе координат в начальный момент времени $t = 0$, то они определяются единичными векторами:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}'_{\rho} &= \cos(\nu_R \Phi) \mathbf{e}_{\rho} + \sin(\nu_R \Phi) \mathbf{e}_{\varphi}, \\ \mathbf{e}'_{\varphi} &= -\sin(\nu_R \Phi) \mathbf{e}_{\rho} + \cos(\nu_R \Phi) \mathbf{e}_{\varphi}.\end{aligned}\quad (55)$$

Все величины в системе отсчета, сопровождающей спин, отмечены штрихами. Угловая скорость спина равна [20]

$$\mathbf{\Omega}' = \mathbf{\omega}_a - \omega_R \mathbf{e}_z = \omega_c \mathbf{F} - \omega_R \mathbf{e}_z, \quad (56)$$

где $\mathbf{F}$ определяется уравнением (52). Направление вектора $\mathbf{\Omega}'$ фиксировано [20], поскольку единичный вектор $\mathbf{e}_{\parallel}$ преобразуется к виду

$$\mathbf{e}_{\parallel} = \cos(\zeta') \mathbf{e}'_{\rho} + \sin(\zeta') \mathbf{e}'_{\varphi}, \quad \zeta' = -R\Phi_0 \pm \varphi.$$

Нормализованная частота прецессии спина в системе отсчета, сопровождающей спин, равна

$$\nu' = \frac{|\mathbf{\Omega}'|}{\omega_c} = \sqrt{(a\gamma_0 - \nu_R^{\pm})^2 + |\varepsilon_R^{\pm}|^2}, \quad (57)$$

где

$$\nu_R^+ = R + \nu, \quad \nu_R^- = R - \nu.$$

В резонансном ЭДМ-эксперименте предполагается использовать горизонтальную начальную поляризацию пучка. Динамика спина частиц зависит от направления спина в начальный момент времени, определяемого азимутом ψ . Азимут $\psi = 0$ соответствует радиальной начальной поляризации в лабораторной системе. РВП характеризуется z -компонентой вектора поляризации.

Поскольку траектории частиц в пучке зависят от их импульсов, соответствующие значения ω_0 могли бы различаться. Однако существуют экспериментальные методы, позволяющие удерживать частоту и фазу вынужденных когерентных продольных колебаний почти равными частоте и фазе вращения спина. Для этого длина прямых участков траектории выбирается такой, чтобы выполнялось равенство

$$\alpha_p = \frac{\Delta p/p}{\Delta L/L} = 1,$$

где $\Delta p = p - p_0$, $\Delta L = L - L_0$, $L \equiv L(p)$, $L_0 \equiv L(p_0)$ и $L(p)$ – длина замкнутой орби-

ты для импульса p . В этом случае $p/L = p_0/L_0$. Так как $p = m\gamma(p)\omega_c(p)\rho(p)$ и $\rho/L = \rho_0/L_0$, g -2-частота не зависит от импульса частиц, то $a\gamma(p)\omega_c(p) = a\gamma(p_0)\omega_c(p_0)$ и $\omega_c(p) = \omega_c(p_0)$ [13].

Поскольку величины ω_R и ω_0 могут несколько различаться и необходимо определить систематическую ошибку, обусловленную ненулевой разностью $\omega_0 - \omega_R$, необходимо использовать общие формулы, определяющие динамику спина. Здесь и ниже в формулы будет включена скорость света c .

Динамика вертикальной компоненты вектора поляризации во вращающейся и лабораторной системах отсчета описывается одним и тем же уравнением, которое имеет вид

$$P_z(\Phi) = \frac{\varepsilon'}{\nu'} P_0 \left\{ \sin(\psi - \zeta') \sin(\nu'\Phi) + \frac{a\gamma_0 - \nu_R}{\nu'} \cos(\psi - \zeta') [1 - \cos(\nu'\Phi)] \right\}, \quad (58)$$

$$\varepsilon' = \frac{e\eta}{8\pi c p_0} E_0 l \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} \pm 1 \right),$$

где ε' – амплитуда резонансной напряженности ($|\varepsilon'| = |\varepsilon_R^\pm|$) и P_0 – начальная поляризация пучка.

Уравнения (52), (56) определяют эволюцию других компонент вектора поляризации:

$$P_\rho(\Phi) = P_0 \left\{ \cos(\nu'\Phi) \cos(\nu_R\Phi + \psi) + \frac{\varepsilon'^2}{\nu'^2} \cos(\psi - \zeta') [1 - \cos(\nu'\Phi)] \cos(\nu_R\Phi + \zeta') - \right. \\ \left. - \frac{a\gamma_0 - \nu_R}{\nu'} \sin(\nu'\Phi) \sin(\nu_R\Phi + \psi) \right\}, \quad (59)$$

$$P_\phi(\Phi) = P_0 \left\{ \cos(\nu'\Phi) \sin(\nu_R\Phi + \psi) + \frac{\varepsilon'^2}{\nu'^2} \cos(\psi - \zeta') [1 - \cos(\nu'\Phi)] \sin(\nu_R\Phi + \zeta') + \right. \\ \left. + \frac{a\gamma_0 - \nu_R}{\nu'} \sin(\nu'\Phi) \cos(\nu_R\Phi + \psi) \right\}.$$

Важно, что подстановка $\nu' \rightarrow -\nu'$ не изменяет значений компонент вектора поляризации, и, следовательно, величины ν' и $\nu'\Phi$ могут быть заменены величинами Ω'/ω_c и $\Omega't$ соответственно.

Если $\nu'\Phi \ll 1$ ($\Omega't \ll 1$),

$$P_\rho(\Phi) = P_0 [\cos(\nu_R\Phi + \psi) - (a\gamma_0 - \nu_R)\Phi \sin(\nu_R\Phi + \psi)], \\ P_\phi(\Phi) = P_0 [\sin(\nu_R\Phi + \psi) + (a\gamma_0 - \nu_R)\Phi \cos(\nu_R\Phi + \psi)], \quad (60)$$

$$P_z = P_0 \varepsilon' \Phi \sin(\psi - \zeta') = \frac{e\eta}{8\pi c p_0} P_0 E_0 l \left(\frac{\omega_0}{a\gamma_0^2 \omega} \pm 1 \right) \omega_c t \sin(\psi - \zeta'). \quad (61)$$

Для эксперимента по поиску электрического дипольного момента дейтрона

$\omega \approx \omega_0$, $\zeta' = \varphi$, и в уравнении (61) должен быть выбран знак плюс. Если используется угол $\Upsilon = \psi - \pi/2$, характеризующий начальное направление спина относительно оси e_ϕ , то

$$\sin(\psi - \zeta') = \cos(\Upsilon - \zeta') = \cos(\Upsilon - \varphi)$$

и уравнение (61) приобретает вид

$$\begin{aligned} P_z &= \frac{e\eta}{8\pi c p_0} P_0 E_0 l \left(\frac{1}{a\gamma_0^2} + 1 \right) \omega_c t \cos(\Upsilon - \varphi) \\ &= \frac{e\eta}{8\pi\beta_0 c^2 p_0} P_0 E_0 l \left(\frac{1}{a\gamma_0^2} + 1 \right) \omega_c L_b \cos(\Upsilon - \varphi). \end{aligned} \quad (62)$$

Из уравнений (49), (62) следует, что

$$P_z = -\frac{1}{4} \eta P_0 \Delta \beta_m \gamma_0 (1 + a\gamma_0^2) \omega_c t \cos(\Upsilon - \varphi). \quad (63)$$

Соответствующая формула, полученная в [11,13], имеет вид

$$P_z = \frac{1}{4} \eta P_0 \Delta \beta_m \gamma_0 \omega_c t, \quad (64)$$

где использованы обозначения, принятые в настоящей работе. В работах [11, 13] был рассмотрен только частный случай $\omega_0 = \omega$, $\Psi = \varphi$.

Уравнение (64) отличается от уравнения (63) отсутствием множителя $(1 + a\gamma_0^2)$. Это совершенно естественно, поскольку в [11, 13] не было учтено влияние электрического поля на динамику спина. Формула, полученная в [11, 13], должна быть дополнена данным множителем. Знаки в уравнениях (63) и (64) противоположны, поскольку в работах [11, 13] величина ω_c считалась положительной.

11. Вклады электрического и магнитного полей в рост вертикальной поляризации в эксперименте, основанном на методе замораживания спина

Интересно сравнить отношение (53) с соответствующим отношением для ЭДМ-эксперимента, основанного на методе «замораживания» спина. Радиальное электрическое поле в этом эксперименте выбирается равным [7]

$$E = \frac{a\beta\gamma^2}{1 - a\beta^2\gamma^2} B.$$

Отношение вкладов электрического и магнитного полей в РВП, обусловленный ЭДМ, имеет вид

$$\kappa = \frac{E}{|\mathbf{\beta} \times \mathbf{B}|} = \frac{a\gamma^2}{1 - a\beta^2\gamma^2}. \quad (65)$$

Для эксперимента с пучком дейтронов [8] $a = a_d = -0.14299$, $\beta = 0.35$, $\gamma = 1.068$ и $\kappa = 0.17$. Следовательно, в эксперименте, основанном на методе «замораживания» спина, влияние электрического поля на РВП необходимо учитывать. Вклад электрического поля пренебрежимо мал в аналогичном эксперименте с мюонами ($a_\mu = 1.1659 \times 10^{-3}$) и является доминирующим в эксперименте с протонами ($a_p = 1.7928$).

12. Заключение

В настоящей работе найден оператор Гамильтона в представлении Фолди – Ваутхойзена для релятивистских частиц, имеющих электрический и магнитный дипольные моменты и взаимодействующих с электромагнитным полем. Выведено квантово-механическое уравнение движения спина. Проведен переход к квазиклассическому приближению и найдено квазиклассическое уравнение движения спина.

Выведена точная формула, определяющая угловую скорость движения частицы в накопительном кольце в горизонтальной плоскости. Найдено точное уравнение движения спина в цилиндрической системе координат с учетом ЭДМ частиц. Это уравнение удобно для аналитического расчета динамики спина, когда конфигурация основных полей достаточно проста. Такой расчет может быть необходим для ряда прецизионных экспериментов. Цилиндрические координаты могут использоваться, когда накопительное кольцо или имеет форму круга, или разделено на круговые секторы пустыми промежутками. Произведено усреднение угловой скорости вращения спина.

Рост вертикальной поляризации в эксперименте по поиску ЭДМ при помощи резонансного метода стимулируется горизонтальным электрическим полем в системе покоя частицы, осциллирующим с резонансной частотой. Это поле определяется преобразованием Лоренца осциллирующего продольного электрического и однородного вертикального магнитного полей. Вклад продольного электрического поля значителен, хотя вклад магнитного поля, обусловленный вынужденными когерентными продольными колебаниями частиц, является доминирующим. Влияние электрического поля на динамику спина не было учтено в предшествующих исследованиях. Учет поправки, даваемой электрическим полем, весьма важен, поскольку он приводит к увеличению эффекта на 23 % для дейтрона и уменьшению его на 12 % для протона. Эффективные поля, определяющие резонансный эффект в эксперименте по поиску ЭДМ, выражены через резонансные напряженности. Динамика спина в эксперименте по поиску ЭДМ дейтрона при помощи резонансного метода рассчитана в общем случае. В предшествующих работах был рассмотрен только частный случай, причем влияние электрического поля на динамику спина не учитывалось.

Литература

1. Foldy L. L., Wouthuysen S. A. // Phys. Rev. 1950. Vol. 78. P. 29.
2. Costella J. P., McKellar B. H. J. // Am. J. Phys. 1995. Vol. 63. P. 1119.
3. Silenko A. J. // J. Math. Phys. 2003. Vol. 44. P. 2952.
4. Courant E. D. // Bull. Am. Phys. Soc. 1962. Vol. 7. P. 33; Courant E. D., Ruth R. D. //

- BNL Report № 51270, 1980.
5. *Semertzidis Y. K.* // Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 2003. Vol. 117. P. 373; hep-ph/0211038; *Bennett G. W.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 161802.
 6. *Farley F. J. M., Semertzidis Y. K.* // Prog. Part. Nucl. Phys. 2004. Vol. 52. P. 1.
 7. *Farley F. J. M., Jungmann K.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 052001.
 8. *Silenko A.* et al. // EDM Collaboration *J-PARC* Letter of Intent: Search for a Permanent Muon Electric Dipole Moment at the 10^{-24} e·cm Level, http://www.bnl.gov/edm/papers/jparc_loi_030109.ps; *Aoki M.* et al. // http://www.bnl.gov/edm/deuteron_proposal_040816.pdf.
 9. *Accomando E., Arnowitt R., Dutta B.* // Phys. Rev. D. 2000. Vol. 61. P. 115003; *Babu K. S., Dutta B., Mohapatra R. N.* // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 5064; *Lebedev O., Olive K. A.* et al. // Phys. Rev. D. 2004. Vol. 70. P. 016003.
 10. *Nelson D. F., Schupp A. A.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1959. Vol. 2, P. 492.
 11. *Orlov Y. F.* // EDM in Storage Rings Internal Note № 69, 2004; STORI 2005 Conf. Proc., Schriften des Forschungszentrums Jülich, Matter and Materials. 2005. Vol. 30. P. 223.
 12. *Semertzidis Y. K.* // STORI 2005 Conf. Proc., Schriften des Forschungszentrums Jülich, Matter and Materials. 2005. Vol. 30. P. 70.
 13. *Orlov Y. F., Morse W. M., Semertzidis Y. K.* // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P. 214802.
 14. *Feng J. L., Matchev K. T., Shadmi Y.* // Nucl. Phys. B. 2001. Vol. 613, P. 366.
 15. *Graesser M., Thomas S.* // Phys. Rev. D. 2002. Vol. 65. P. 075012.
 16. *Базров В. Г., Бордовицын В. А.* // Известия ВУЗ. Физика. 1980. № 2, С. 67.
 17. *Thomas L. H.* // Nature. 1926. Vol. 117, P. 514; Philos. Mag. 1927. Vol. 3, P. 1.
 18. *Frenkel J.* // Zeits. f. Phys. 1926. Vol. 37. P. 243.
 19. *Bargmann V., Michel L., Telegdi V. L.* // Phys. Rev. Lett. 1959. Vol. 2. P. 435.
 20. *Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance: With Examples from Solid State Physics. 1963; Principles of Magnetic Resonance, 3rd ed. 1990.
 21. *Jackson J. D.* Classical Electrodynamics, 2nd ed. 1975. P. 355.
 22. *Semertzidis Y. K.* // EDM in Storage Rings Internal Notes № 82, 85, 92, 2005.
 23. *Chiladze D.* et al. // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2006. Vol. 9. P. 050101.
 24. *Altmeier M.* et al. // Eur. Phys. J. A 2005. Vol. 23. P. 351.
 25. *Roser T.* // Handbook of Accelerator Physics and Engineering. 1999. P. 151.
 26. *Bai M., MacKay W. W., Roser T.* // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2005. Vol. 8. P. 099001.
 27. *Lee S. Y.* // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2006. Vol. 9. P. 074001.
 28. *Lee S. Y.* Spin Dynamics and Snakes in Synchrotrons. 1997.
 29. *Minty M. G., Zimmermann F.* Measurement and Control of Charged Particle Beams. 2003. Chap. 10.
 30. *Morozov V. S.* et al. // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2004. Vol. 7. P. 024002.
 31. *Morozov V. S.* et al. // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2005. Vol. 8. P. 099002.
 32. *Leonova M. A.* et al. // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2006. Vol. 9. P. 051001.
 33. *Stephenson E.* // EDM in Storage Rings Internal Note № 78, 2005.

SPIN DYNAMICS IN EXPERIMENTS ON A SEARCH FOR ELECTRIC DIPOLE MOMENTS OF PARTICLES, PERFORMED IN STORAGE RINGS

A. J. Silenko

The Hamilton operator in the Foldy-Wouthuysen representation for relativistic particles having electric and magnetic dipole moments and interacting with an electromagnetic field has been found. The transition to the semiclassical description has been fulfilled. Quantum-mechanical and classical equations of spin motion have been derived.

The exact formula for the angular velocity of particle motion in the horizontal plane has been obtained. The exact equation defining the spin motion in the cylindrical coordinate system with allowance for the particle electric dipole moments of particles has been derived. This equation is convenient for analytical calculations of spin dynamics when the configuration of the main fields is simple enough. Such calculations can be needed for several high-precision experiments. Cylindrical coordinates can be used if the ring is either circular or divided into circular sectors. Averaging of the angular velocity of spin rotation has been performed.

A buildup of the vertical polarization in the resonant electric-dipole-moment experiment [13] is affected by a horizontal electric field in the particle rest frame oscillating at a resonant frequency. This field is defined by the Lorentz transformation of an oscillating longitudinal electric field and a uniform vertical magnetic one. The effect of a longitudinal electric field is significant, while the contribution from a magnetic field caused by forced coherent longitudinal oscillations of particles is dominant. The effect of electric field on the spin dynamics has not been taken into account in previous calculations. The electric-field correction is important because it leads to decreasing the electric-dipole-moment effect by 23 percent for the deuteron and increasing it by 12 percent for the proton. The effective fields defining the resonant effect have been expressed in terms of the resonance strengths. The spin dynamics in the resonant deuteron electric-dipole-moment experiment has been calculated in the general case. In previous works, the special case has only been considered and the effect of the electric field on the spin dynamics has not been taken into account.

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ НЕЙТРОННОГО КРИСТАЛЛ-ДИФРАКЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА К ЭЛЕКТРИЧЕСКОМУ ДИПОЛЬНОМУ МОМЕНТУ НЕЙТРОНА И P-, T-НЕЧЕТНЫМ ЯДЕРНЫМ СИЛАМ

В. Г. Барышевский, С. Л. Черкас

Наличие у нейтрона электрического дипольного момента (ЭДМ) требует одновременного нарушения инвариантности относительно инверсии как времени (Т), так и пространственной координаты (Р). В моделях, объясняющих барионную асимметрию Вселенной, ЭДМ нейтрона оказывается на уровне $\sim 10^{-26} - 10^{-28} \text{ е} \cdot \text{см}$ [1], так что его обнаружение было бы прямым свидетельством в пользу объединяющих различные взаимодействия моделей, таких как суперсимметричные и модели Великого объединения.

Более того, в последнее время нарастает интерес и к исследованию Т-нечетных констант взаимодействия нейтрона с ядром. Однако в данных исследованиях существуют серьезные проблемы, связанные с методикой таких экспериментов, поэтому разработка методов, чувствительных к Т-нечетным взаимодействиям нейтрона с ядром, является важной и насущной задачей современной физики.

Поскольку в кристалл-дифракционном эксперименте [2–9] нейтроны взаимодействуют с атомами кристалла, то возможно несколько механизмов, приводящих к Р-, Т-нечетному вращению спина нейтрона в кристалле, а именно взаимодействие электрического дипольного момента нейтрона с электрическим полем кристалла и нарушающее пространственную четность и инвариантность относительно обращения времени ядерное взаимодействие нейтрона с ядрами. Ниже будут подробно рассмотрены эти два механизма нарушения Р-, Т-инвариантности в области тепловых и резонансных энергий нейтронов.

Согласно работам [6, 7], угол поворота ϕ_{PT} поляризации нейтрона в кристалле толщины L определяется спин-зависящей частью показателя преломления:

$$\phi_{PT} = 2kL |\mathbf{M}_{PT}|, \quad (1)$$

где k – волновое число нейтрона, $\mathbf{M}_{PT}$ – абсолютное значение вектора, входящего в формулу для Р-, Т-нечетной матричной части показателя преломления нейтрона в кристалле: $n_{PT} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}_{PT}$.

При условии слабой дифракции на некоторой системе плоскостей кристалла (рис. 1), соответствующих вектору обратной решетки $\boldsymbol{\tau}$, показатель преломления может быть записан в виде

$$n_{PT} \sim \left(\frac{4\pi}{k^2 V} \right)^2 \frac{f_s f_{PT}(\boldsymbol{\tau})}{2\alpha_B} e^{-2w(\boldsymbol{\tau})} s(\boldsymbol{\tau}), \quad (2)$$

где f_s – амплитуда упругого рассеяния нейтрона на ядре (длина рассеяния), $f_{PT}(\mathbf{q})$ – Р-, Т-нечетная амплитуда упругого рассеяния;

$$\alpha_B = \frac{\tau(\tau + 2k)}{k^2}, \quad (3)$$

где V – объем единичной ячейки, $e^{-w(\tau)} = \exp(-u^2\tau^2/4)$ – фактор Дебая – Уоллера и u^2 – средний квадрат амплитуды теплового движения атомов относительно положения равновесия.

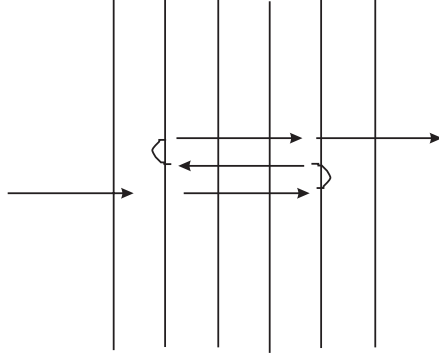


Рис. 1. Перерасcеяние нейтрона кристаллическими плоскостями

Множитель $s(\tau) = \sum_{jl} \{ \exp(i\tau \mathbf{R}_l) - \exp(-i\tau \mathbf{R}_j) \}$, где суммирование проводится по атомам одной единичной ячейки кристалла, описывает степень нецентросимметричности кристалла [10], т. е. $s(\tau)$ равно нулю для кристаллов, обладающих центром симметрии, и таким образом только нецентросимметричные (пьезоэлектрические) кристаллы пригодны для эксперимента.

В геометрии обратного рассеяния только Р-, Т-нечетные взаимодействия приводят к вращению спина, наблюдение которого и будет свидетельствовать о нарушении указанных симметрий.

Сравним вклад различных источников Р-, Т-нарушения, а именно Р-, Т-нечетных ядерных сил и взаимодействия ЭДМ нейтрона с электрическим полем кристалла в поворот спина нейтрона, который планируется наблюдать. Рассмотрим сначала Р-, Т-нечетную амплитуду рассеяния нейтрона ядром (атомом) кристалла. Данная амплитуда содержит электромагнитную и ядерную части. Последняя может быть выведена в приближении однопионного обмена из лагранжиана взаимодействия нуклонного и мезонного полей. Для простоты будем рассматривать обмен только π -мезоном, изображенный на рис. 2, а. В этом случае плотность лагранжиана взаимодействия может быть записана в виде [11]

$$L = ig_\pi \bar{N} \gamma_5 (\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\pi}) N + \bar{g}_\pi^{(0)} \bar{N} (\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\pi}) N + \bar{g}_\pi^{(1)} \bar{N} \pi_0 N + \bar{g}_\pi^{(2)} \bar{N} (3\tau^z \pi_0 - \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\pi}) N, \quad (4)$$

где $N(x)$ – амплитуда нуклонного поля и $\pi_0(x)$, $\boldsymbol{\pi}(x)$ амплитуды полей нейтральных и заряженных π -мезонов.

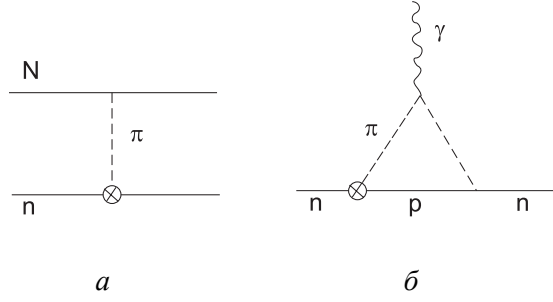


Рис. 2. Диаграмма однопионного обмена (а), вклад пионной петли в ЭДМ нейтрона (б); Р-, Т-нарушающая вершина отмечена крестиком

Три последних слагаемых в (4) нарушают пространственную четность и инвариантность относительно обращения времени. В рамках однопионного обмена [11] можно вывести соответствующий потенциал нуклон-нуклонного взаимодействия:

$$\begin{aligned}
 V_{PT}^{(\pi)} = & \frac{1}{2m_N m_\pi^2} (g_\pi \bar{g}_\pi^{(0)} (\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\tau}_1) (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_1) + \\
 & + g_\pi \bar{g}_\pi^{(1)} ((\tau_1^z + \tau^z)(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_1) + (\tau_1^z - \tau^z)(\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}_1)) + \\
 & + g_\pi \bar{g}_\pi^{(2)} (3\tau_1^z \tau^z - \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\tau}_1) (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_1)) \cdot \nabla \delta^{(3)}(\mathbf{r}),
 \end{aligned} \quad (5)$$

где вследствие малой энергии нейтронов для простоты принимается, что взаимодействие имеет нулевой радиус действия. Полученное Р-, Т-нечетное нуклон-нуклонное взаимодействие позволяет найти Р-, Т-нечетный потенциал взаимодействия нейтрона с ядром. Предположим для простоты, что ядро состоит из одинакового количества протонов и нейтронов с пространственным распределением $\rho(\mathbf{r})$, нормированным на единицу: $\int \rho(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = 1$. Усреднение нуклон-нуклонного взаимодействия приводит к нейтрон-ядерному потенциалу следующего вида:

$$V_{\text{NPT}} = -\frac{A}{m_N m_\pi^2} g_\pi \bar{g}_\pi^{(1)} \boldsymbol{\sigma} \nabla \rho(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где A – число нуклонов в ядре, а также использовано соотношение

$$\int \rho(\mathbf{r}') \nabla \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \nabla \rho(\mathbf{r}).$$

Слагаемые из (5), которые пропорциональны $\bar{g}_\pi^{(0)}$ и $\bar{g}_\pi^{(2)}$, не дают вклада в потенциал нуклон-ядерного взаимодействия, поскольку их изоспиновая зависимость приводит к противоположному знаку для $n-n$ и $n-p$ взаимодействий, в то время как мы предполагали равное число нейтронов и протонов в ядре.

Следующий шаг состоит в расчете амплитуды упругого рассеяния нейтрона на ядре в первом порядке по переданному импульсу $\mathbf{q}$:

$$f_{\text{NPT}}(\mathbf{q}) = -\frac{m_N}{2\pi} \int V_{\text{NPT}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r = iA \frac{g_\pi \bar{g}_\pi^{(1)}}{2\pi} \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{q}}{m_\pi^2}, \quad (7)$$

где мы положили $\rho(\mathbf{r}) = A\delta^{(3)}(\mathbf{r})$ для упрощения расчета.

Как уже говорилось, другим источником нарушения Р-, Т-инвариантности является взаимодействие электрического дипольного момента нейтрона с электрическим полем:

$$V_{\text{EDM}} = -d_n \boldsymbol{\sigma}\mathbf{E} = d_n \boldsymbol{\sigma}\nabla \left(\frac{Ze}{r} \exp(-r/R_a) \right) = -d_n Z e \frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{r})}{r} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{rR_a} \right) \exp(-r/R_a), \quad (8)$$

Вычисление амплитуды рассеяния для этого случая приводит к следующему выражению:

$$\begin{aligned} f_{\text{EDM}}(\mathbf{q}) &= \frac{m_n}{2\pi} d_n Z e \int \frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{r})}{r} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{rR_a} \right) \exp(-r/R_a) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \\ &= -2i m_n d_n Z e \frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{q})}{q^2} \left(1 - \frac{1}{1+q^2 R_a^2} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где радиус экранирования считается равным радиусу атома R_a .

Следует заметить, что электрический дипольный момент нейтрона также может быть выражен через константы пион-нуклонного взаимодействия [12]:

$$d_n = \frac{e}{4\pi^2 m_n} g_\pi \bar{g}_\pi^{(0)} \ln \frac{m_n}{m_\pi}, \quad (10)$$

что дает возможность сравнивать величину амплитуд упругого рассеяния даваемых выражениями (7) и (9). Окончательный вывод состоит в том, что вклад от взаимодействия ЭДМ нейтрона с электрическим полем атома в угол вращения поляризации нейтрона в кристалле намного больше вклада, возникающего из-за Р-, Т-нечетных короткодействующих ядерных взаимодействий (ср. вторую и пятую колонки таблицы), если сделать достаточно естественное предположение $\bar{g}_\pi^{(0)} \approx \bar{g}_\pi^{(1)}$.

Однако можно задать вопрос, что произойдет, если наблюдение вращения спина проводить в окрестности p -резонансов составного ядра. Как известно, Р-нечетные и Р-, Т-нечетные эффекты ядерного происхождения претерпевают существенное усиление в этом случае.

В окрестности p -резонанса в предположении, что вблизи расположен s -резонанс, амплитуда рассеяния имеет вид [13, 14]

$$f_{PT}^{\text{res}}(\mathbf{q}) = \frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{q})}{k^2} \frac{\gamma_p W_{ps} \gamma_s}{(E - E_p + i\Gamma_p)(E_s - E_p)}, \quad (11)$$

где γ_p – амплитуда захвата в p -резонанс, γ_s – амплитуда захвата в s -резонанс, W_{sp} – матричный элемент Р-, Т-нечетного взаимодействия между s - и p -состояниями компаунд-ядра. Амплитуда захвата в p -резонанс подавлена по

сравнению с амплитудой захвата в s -резонансе: $\gamma_p = (kR)\gamma_s$, где R – радиус ядра. В соответствии с теорией реакций, идущих через составное ядро, $\Psi_p = \sum_m^N C_{pm} \psi_m$, где ψ_m – базисные волновые функции оболочечной модели и $N \sim 10^6$ число «главных» компонент в волновой функции составного ядра [13, 14]. Коэффициенты C_{pm} , так же как C_{sm} , являются случайными величинами, что приводит к следующей формуле для матричного элемента между компаунд состояниями: $W_{sp} = W/\sqrt{N}$, где W – характерная величина одночастичного Р-, Т-нечетного взаимодействия, которая, согласно (6), может быть оценена как $W = \frac{g_\pi \bar{g}_\pi^{(1)} A}{m_n m_\pi^2 R^4}$. Следует отметить, что не только одночастичное взаимодействие (6) дает вклад в матричный элемент, но также и исходное двухчастичное взаимодействие (5). Таким образом, по-видимому, вклад в матричный элемент W от слагаемых, пропорциональных $\bar{g}_\pi^{(0)}$ и $\bar{g}_\pi^{(2)}$, такого же порядка, как от $\bar{g}_\pi^{(1)}$. Принимая во внимание оценку для интервала энергий между s - и p -резонансами $E_s - E_p = \Delta E/N$, где $\Delta E = 7$ МэВ – типичная разность энергий между состояниями оболочечной модели, мы приходим к следующему виду амплитуды упругого рассеяния:

$$f_{PT}^{res}(q) = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q})}{k^2} \frac{1}{kR} \frac{\sqrt{N} W}{\Delta E} \frac{\gamma_p^2}{\Gamma_p} \quad (12)$$

в окрестности p -резонанса, когда $E - E_p = \Gamma_p$.

Существует еще один метод оценки Р-, Т-нечетной резонансной амплитуды – использование результатов измерений Р-нечетного вращения спина в ^{139}La [15–18]. Из результатов этих экспериментов можно оценить отношение матричного элемента Т-инвариантного Р-нечетного взаимодействия между s - и p -резонансами к разности энергий резонансов [15–18]:

$$\frac{\tilde{W}_{sp}}{E_s - E_p} = \frac{1.7 \times 10^{-3}}{38} = 4.5 \times 10^{-5}. \quad (13)$$

Можно предположить, что данный матричный элемент происходит от Р-нечетного взаимодействия, которое описывается мезон-нуклонным лагранжианом, состоящим из сильного и Р-нечетного слагаемых [19]:

$$L = ig_\pi \bar{N} \gamma_5 (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\pi}) N + h_\pi \bar{N} (\boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\pi})_3 N, \quad (14)$$

из которого можно получить Р-нечетное нуклон-нуклонное взаимодействие следующего вида:

$$V(r) = i \frac{g_\pi h_\pi}{2\sqrt{2} m_n m_\pi^2} (\boldsymbol{\tau}_1 \times \boldsymbol{\tau}_2)_3 (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) [(\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2), \delta^{(3)}(\mathbf{r})]. \quad (15)$$

Далее можно предположить, что коэффициент пропорциональности, который

определяется сложной структурой компаунд состояний, между произведением констант $g_\pi h_\pi$ (Р-нечетное Т-четное взаимодействие) и матричным элементом $\tilde{W}_{sp}$ такой же, как для констант $g_\pi \bar{g}_\pi^{(i)}$ (Р-нечетное Т-нечетное взаимодействие) и матричного элемента W_{sp} . В результате находим W_{sp} :

$$W_{sp} = \frac{g_\pi \bar{g}_\pi^{(i)}}{g_\pi h_\pi} \tilde{W}_{sp}, \quad (16)$$

где $g_\pi = 13$ и оценка для Р-нечетной константы h_π приведена в [19, 20]: $h_\pi = 1.9 \times 10^{-7}$. Значения других необходимых параметров: полная ширина p -резонанса $\Gamma_p = 0.045$ эВ, нейтронная ширина резонанса $\Gamma_p^n = 3.6 \times 10^{-8}$ эВ, нейтронная ширина s -резонанса $\Gamma_s^n = 0.1$ эВ, интервал энергии до ближайшего s -резонанса $E_s - E_p \sim 38$ эВ [19, 20].

Перейдем к оценке угла поворота спина нейтрона. Будем рассматривать наиболее выгодную геометрию отражения назад (угол Брэгга равен 180°). Для α_B (3), описывающего расстройку от выполнения точного условия Брэгга, имеем

$$\alpha_B = 4(\Delta k/k + \Delta\theta^2), \quad (17)$$

поскольку $\tau = 2k$. Параметр $\Delta\theta \sim 10^{-3}$ определяется мозаичностью кристалла и при этом должно быть $\Delta k/k = \Delta\theta^2 = 10^{-6}$. Оставшиеся параметры следующие: $L = 0.5$ м, $u = 0.1$ Å, $V^{1/3} = 5$ Å, $R_a = 2$ Å, $R = 1.45A^{1/3}$ фм, где $A = 139$ массовое число ядра, $Z = 57$ заряд. Фактор $s(\tau)$, описывающий нецентросимметричность кристалла, взят равным единице, поскольку в большинстве пьезоэлектрических кристаллов центральная симметрия нарушена сильно. Величина электрического дипольного момента нейтрона взята 10^{-26} е·см, соответствующее этому значению произведение констант $g_\pi \bar{g}_\pi^{(i)}$ находится из уравнения (10) в предположении, что Р-, Т-нарушающие константы $\bar{g}_\pi^{(1)}$, $\bar{g}_\pi^{(2)}$, $\bar{g}_\pi^{(3)}$ одного порядка величины. Следует заметить, что, кроме того, $\Delta\theta$ должно быть больше мозаичности кристалла (типичная величина 10^{-3} – 10^{-4}), оно также должно удовлетворять условию слабости дифракции: $\alpha_B = 4(\Delta\theta^2 + \Delta k/k) \gg \frac{4\pi}{k^2 V} f_s$.

Подводя итог, можно сделать вывод, что ЭДМ нейтрона вносит главный вклад во вращение спина нейтрона в условиях дифракции в нецентросимметричном кристалле при энергиях тепловых нейтронов около 0.003 эВ (см. таблицу). Необходимое число нейтронов для измерения угла поворота спина составляет $N_{tot} = 1/\phi_{EDM}^2 = 7 \times 10^7$ и, например, при потоке нейтронов на дне канала реактора $N_0 = 10^{15}$ нейтрон/(см²·с) и площади кристалла $S = 30 \times 30$ см² время накопления данных составит всего $T = N_{tot}/(N_0 S \frac{\Delta\theta}{\pi} 2 \frac{\Delta k}{k}) \approx 0.12$ с.

Угол вращения спина нейтрона: ϕ_{EDM} – из-за вклада ЭДМ нейтрона, ϕ_{NPT}, ϕ_{res} – из-за Р-, Т-нечетных ядерных сил при потенциальном и резонансном рассеянии соответственно

E, eV	$\Delta\theta$	$\Delta k/k$	$\frac{4\pi}{k^2 V} f_s$	ϕ_{EDM}	ϕ_{res}	ϕ_{NPT}
0.003	10^{-3}	10^{-6}	5.6×10^{-6}	1.2×10^{-4}	–	2.8×10^{-11}
0.1	10^{-3}	10^{-6}	1.7×10^{-7}	6.9×10^{-8}	–	6.7×10^{-13}
0.73	10^{-3}	10^{-6}	2.4×10^{-8}	2.9×10^{-10}	* 8.3×10^{-9}	2.0×10^{-14}
					** 5.6×10^{-10}	
0.73	10^{-3}	10^{-8}	2.4×10^{-8}	2.9×10^{-8}	* 8.3×10^{-7}	2.0×10^{-12}
					** 5.6×10^{-8}	

Примечание. Величины, помеченные *, соответствуют оценкам по формуле (12), в то время как величины, помеченные **, соответствуют оценкам, следующим из уравнений (11), (13), (16).

В области энергий около 0.73 эВ, соответствующей p -резонансу лантана ^{139}La , главный вклад вносят Р-, Т-нечетные ядерные силы (см. последнюю и предпоследнюю строки таблицы случай *). Однако требуемое число нейтронов для этого случая составляет $N_{tot} = 1.5 \times 10^{12}$ и при том же потоке нейтронов и площади кристалла требуемое время $T = 30$ дней. Таким образом, эксперимент в резонансной области имеет смысл проводить только на специализированных реакторах, в которых поток нейтронов с энергией 1 эВ намного больше, чем с энергией 0.001–0.003 эВ.

Литература

1. Baker C. A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. P. 131801.
2. Shull C. G., Nathans R. // Phys. Rev. Lett. 1967. Vol. 19. P. 384.
3. Forte M. // J. Phys. G. 1983. Vol. 9. P. 745.
4. Forte M., Zagen C. // Nucl. Inst. Meth. A. 1989. Vol. 284. P. 147.
5. Fedorov V. V., Voronin V. V., Lapin E. G. // J. Phys. G. 1992. Vol. 18. P. 1133.
6. Барышевский В. Г. // Ядерная физика. 1995. Т. 58. С. 1558.
7. Baryshevsky V. G. // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 1997. Vol. 23. P. 509.
8. Лапин Е. Г. и др. // Письма ЖЭТФ. 2001. Т. 74. С. 279.
9. Fedorov V. V. et al. // Appl. Phys. 2002. Vol. A74. P. s91.
10. Для простоты мы привели выражение для фактора $s(\tau)$ справедливое только для кристалла, состоящего из одного вида атомов. В общем случае необходимо рассматривать сумму общего вида $\sum_j f_j(\mathbf{r}) f_l(-\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{r}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l))$ [6, 7], где $\mathbf{R}_j$ – положение атома в ячейке кристалла и f_j – соответствующая амплитуда рассеяния.

11. *Liu C.-P., Timmermans R. G. E.* // Phys. Rev. C. 2004. Vol. 70. P. 055501.
12. *Pospelov M, Ritz A.* // Ann. Phys. (N.Y.). 2005. Vol. 318. P. 119.
13. *Bunakov V. E., Gudkov V. P.* // J. de Phys. (Paris). 1984. Vol. 45. P. C3.
14. *Сушков О. П., Фламбаум В. В.* // Письма ЖЭТФ. 1980. Т. 32. С. 377.
15. *Алфименков В. П. и др.* // Письма ЖЭТФ. 1982. Т. 35. С. 42.
16. *Весна В. А. и др.* // Изв. Акад. Наук. СССР, сер. физ. 1982. Т. 46. С. 2116.
17. *Haseyama T. et al.* // Phys. Lett. B. 2002. Vol. 534. P. 39.
18. *Серебров А. П. и др.* // Письма ЖЭТФ 1995. Т. 62. С. 529.
19. *Zhu S.-L. et al.* // Nucl. Phys. A. 2005. Vol. 748. P. 435.
20. *Shwe H., Cote R. E., Prestwich W. V.* // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. P. 1050.

SENSITIVITY OF THE NEUTRON CRYSTAL DIFFRACTION EXPERIMENT TO THE NEUTRON EDM AND TO THE NUCLEAR P-, T-VIOLATING FORCES

V. G. Baryshevsky, S. L. Cherkas

We establish a link between an angle of the neutron polarization rotation in a crystal diffraction experiment and constants of the P-, T-violating interactions. The consideration applies to the energy range of thermal and resonance neutrons.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЛАЗЕРА, ПОМЕЩЕННОГО В АКСИАЛЬНОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, ДЛЯ ПОИСКА НАРУШЕНИЯ P-, T-ИНВАРИАНТНОСТИ

В. Г. Барышевский, С. Л. Черкас, Д. Н. Мацукевич*

1. Введение

Стандартная модель предсказывает электрический дипольный момент электрона на уровне 10^{-40} е·см, в то время как некоторые варианты суперсимметричных моделей прогнозируют намного большие величины порядка 10^{-30} е·см [1, 2, 3]. Поскольку суперсимметрия является важной составляющей современных теоретических построений, представляется привлекательным получить точность измерения ЭДМ, достаточную для проверки суперсимметрии. Следует отметить, что современное экспериментальное ограничение на величину ЭДМ составляет $d_e < 1.6 \times 10^{-27}$ [4].

Измерение угла поворота плоскости поляризации света, распространяющегося сквозь газ, помещенный в электрическое поле, является одним из способов получения ограничений на ЭДМ электрона, а также P-, T-неинвариантные взаимодействия электрона с ядром атома. Воздействие электрического поля на атомы приводит к расщеплению атомных уровней, аналогичному эффекту Зеемана и, следовательно, к вращению плоскости поляризации (по аналогии с эффектом Фарадея), когда фотоны распространяются вдоль направления электрического поля.

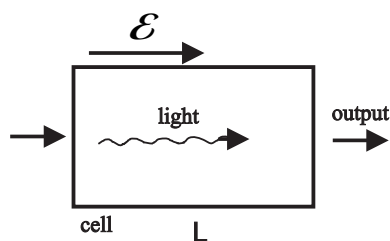


Рис. 1. Схема эксперимента по поиску P-, T-неинвариантного вращения плоскости поляризации

В работах [5–7] было показано, что кроме расщепления атомных уровней существует еще один механизм, приводящий к повороту плоскости поляризации света в электрическом поле, а именно интерференция Штарковской и P-, T-неинвариантной амплитуд рассеяния фотона на атоме.

В типичном эксперименте на прохождение света через ячейку с газом (рис. 1) интенсивность света убывает из-за поглощения. Это ограничивает длину, на которой измеряется угол поворота поляризации [8]. Однако была предложена идея [7] использовать фотонную ловушку с усилителем (рис. 2), чтобы компенсировать затухание света.

* Университет Мэриленда, США.

Поскольку ловушка содержит усилитель с возбужденной средой потери света компенсируются и свет может циркулировать по резонатору в течение длительного времени. Простейшую ловушку такого типа представляет собой лазер, помещенный в электрическое поле (рис. 3). Эта система имеет общие черты с лазером, помещенным в магнитное поле и изученным в 70-е гг. [9–13], а также недавно в свете лазерной магнитометрии [14, 15].

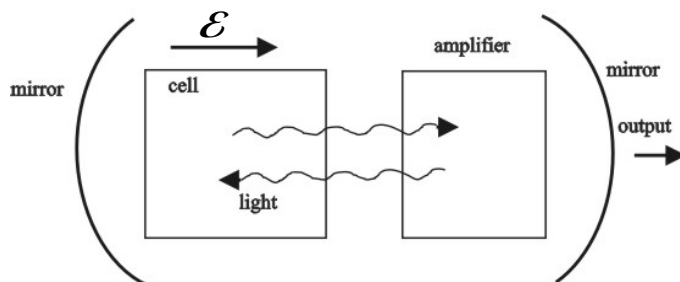


Рис. 2. Газовая ячейка с усилителем [7] для наблюдения Р-, Т-неинвариантного вращения плоскости поляризации света

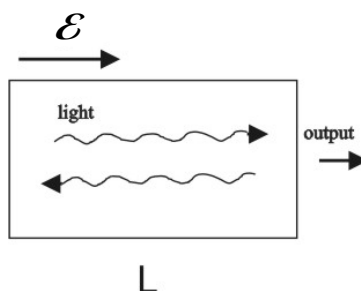


Рис. 3. Лазер, помещенный во внешнее электрическое поле

Главной трудностью в лазерной магнитометрии является анизотропия потерь резонатора лазера [14, 15]. Эта же трудность переносится на измерение Р-, Т-неинвариантного вращения поляризации света в электрическом поле, так как анизотропия потерь резонатора намного больше циркулярной анизотропии, создаваемой Р-, Т-неинвариантными взаимодействиями. Напомним, что в отсутствие линейной анизотропии потерь резонатора угол поворота плоскости поляризации линейно растет со временем, причем угловая скорость вращения пропорциональна Р-, Т-нечетной поляризуемости атома и напряженности электрического поля. При наличии большой анизотропии потерь плоскость поляризации не вращается, а именно при включении электрического поля она поворачивается на небольшой угол и останавливается. Именно этот угол подлежит измерению в экспериментах по поиску Р-, Т-неинвариантности. Ниже мы приведем детальный теоретический анализ фотонной ловушки, необходимой для таких экспериментов.

2. Угол поворота плоскости поляризации в электрическом поле

Рассмотрим установившуюся электромагнитную волну в резонаторе, содержащем возбужденную среду, проявляющую линейную и циркулярную ани-

зотропию. Эффект вращения плоскости поляризации описывается Р-, Т-неинвариантным слагаемым $n_{PT}^{ij} \sim e^{ijk} \mathbf{E}^k$ в матрице показателя преломления среды [16, 17], где e^{ijk} – полностью антисимметричный тензор и E – внешнее электрическое поле. Пусть зеркала резонатора перпендикулярны оси z , и внешнее электрическое поле $\mathbf{E}$ направлено вдоль данной оси. Систему отсчета удобно выбрать так, чтобы матрица анизотропных потерь была диагональной. Таким образом, тензорная часть показателя преломления принимает вид

$$\Delta \hat{n}' = \begin{pmatrix} -d - i\chi & b + ia \\ b - ia & d + i\chi \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где χ , a описывают линейную анизотропию потерь и циркулярную анизотропию соответственно. Линейные фазовые анизотропии обозначены как b и d . Штрих в (1) означает, что данный показатель преломления соответствует возбужденной среде и отличается от показателя преломления в основном состоянии.

Показатель преломления действует как матрица в пространстве векторов $\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$,

где E_x и E_y – компоненты электрического поля электромагнитной волны.

Линейная анизотропия потерь может быть записана как $\chi = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{Q_y} - \frac{1}{Q_x} \right) \approx \frac{1}{4} \frac{\Delta Q}{Q^2}$, где $\Delta Q = Q_x - Q_y$ (см. приложение). Величины Q_x и Q_y

представляют собой добротности резонатора для света, поляризованного вдоль осей x и y соответственно. В принципе современные технологии позволяют достигнуть очень малой анизотропии резонатора. Например, в экспериментах [14, 15] величина $\frac{\Delta Q}{Q} = \frac{Q_x - Q_y}{Q} \sim 10^{-5}$. В наших оценках мы использовали величину 10^{-6} , что является реальным для современных технологий получения однородных материалов и конструирования резонаторов.

Циркулярная анизотропия $a = \frac{1}{2} \Delta n'_{PT} = \frac{1}{2} (n'_+ - n'_-)$ возникает во внешнем электрическом поле при условии нарушения Р-, Т-инвариантности. Линейные фазовые анизотропии $d = \frac{1}{2} (n'_y - n'_x)$ и $b = -\frac{1}{2} (n'_{135^\circ} - n'_{45^\circ})$, где $n'_x, n'_y, n'_{135^\circ}, n'_{45^\circ}$ представляют собой показатели преломления для волны поляризованной вдоль оси x , y , а также под углом 135° и 45° (относительно оси x) соответственно. Если повернуть систему отсчета на угол 45° , величины b займут диагональные позиции в матрице показателя. Однако более удобен циркулярный $\begin{pmatrix} E_+ \\ E_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -E_x - iE_y \\ E_x - iE_y \end{pmatrix}$, в котором показатель преломления имеет вид

$$\hat{\Delta n'} = \begin{pmatrix} a & d - ib + i\chi \\ d + ib + i\chi & -a \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Измерения должны выполняться анализатором, размещенным перпендикулярно плоскости поляризации лазерного излучения (когда электрическое поле выключено). Ориентация плоскости поляризации лазерного излучения определяется остаточной анизотропией потерь и совпадает с одной из главных осей, т. е. направлена вдоль вектора $\mathbf{h} = \{\chi, 0, 0\}$.

При включении электрического поля возникает пропорциональная его напряженности циркулярная анизотропия a и плоскость поляризации повернется на угол ϕ_{las} , определяемый уравнением (29) из приложения, которое описывает стационарную поляризацию света. Угол ϕ_{las} равен половине угла между вектором $\mathbf{O}$ при $a = 0$, т. е. когда нет электрического поля и при некотором a , появившемся после включения электрического поля. В типичной экспериментальной ситуации $a, b, d \ll \chi$. Векторы $\mathbf{h}$, $\mathbf{r}$ в (29) равны $\mathbf{h} = \{\chi, 0, 0\}$ и $\mathbf{r} = \{d, b, a\}$. Стационарное решение для вектора $\mathbf{O}$, описывающее поляризационное состояние стоячей электромагнитной волны, имеет вид (29)

$$\mathbf{O}_0 = \left(1, \frac{a}{\chi} + \frac{bd}{\chi^2}, \frac{ad}{\chi^2} - \frac{b}{\chi} \right) \quad (3)$$

в первом порядке a, b, d .

Из выражения (3) легко найти угол поворота плоскости поляризации:

$$\phi_{las} \approx \frac{1}{2} \frac{O_{0y}}{O_{0x}} \approx \frac{a}{2\chi} \approx \Delta n'_{PT} \frac{Q^2}{\Delta Q}. \quad (4)$$

Как можно увидеть из уравнения (3), появляется также добавочный паразитный угол $\frac{bd}{2\chi^2}$, в котором, однако, отсутствует линейная зависимость от электрического поля. Еще один добавочный угол (так называемый «базовый» угол [8]) возникает из-за неточной перпендикулярности анализатора начальной плоскости поляризации лазерного излучения (до включения электрического поля).

В эксперименте обычно используют модуляцию базового угла с некоторой частотой Ω , помещая ячейку Фарадея между лазером и анализатором. Сигнал на выходе анализатора пропорционален квадрату суммы Р-, Т-нарушающего угла и базового угла. Присутствие компоненты с частотой Ω в Фурье преобразовании выходного сигнала и будет означать нарушение Р-, Т-инвариантности.

3. Оценки для эксперимента с ловушкой и эксперимента на прохождение

Проведем сравнение лазерного эксперимента с экспериментом на прохождение. Нарушающий Р-, Т-инвариантность показатель преломления не зависит от типа атомного перехода, т. е. он примерно одинаков для электрического дипольного, магнитного дипольного и сильно запрещенного магнитного дипольно-

го переходов [6]. В эксперименте на прохождение угол поворота поляризации оптимально измерять на примерно двух длинах поглощения, так что выгодно выбирать переходы с максимальной длиной поглощения, например, магнитные дипольные и сильно запрещенные магнитные дипольные. Угол поворота плоскости поляризации в ячейке длиной L равен [5–8]

$$\phi = \frac{1}{2} \Delta n_{PT} k L, \quad (5)$$

где k – волновое число фотона. Как уже указывалось, Δn_{PT} в уравнении (5) отличается от $\Delta n'_{PT}$ в выражении (4). Первая величина соответствует среде в основном состоянии и переходы происходят из основного состояния в возбужденное, в то время как в случае лазерной среды переходы происходят с верхнего уровня на нижний. Эти величины связаны друг с другом соотношением

$$\Delta n'_{PT} = \frac{\Delta N}{N} \Delta n_{PT}, \quad (6)$$

где N – концентрация атомов, и ΔN – плотность инверсно заселенных атомов. Подставляя $\Delta n'_{PT}$ из (6) в уравнение (4) мы получаем

$$\phi_{las} \sim \frac{\Delta N}{N} \Delta n_{PT} \frac{Q^2}{\Delta Q} \sim \Delta n_{PT} k \frac{1}{N \sigma} \frac{Q}{\Delta Q}. \quad (7)$$

При выводе этого выражения мы использовали условие функционирования лазера

$$\Delta N \sigma = \frac{k}{Q}, \quad (8)$$

где σ – сечение поглощения для данного перехода. Из уравнений (7) и (5) можно видеть, что угол вращения плоскости поляризации в лазерном эксперименте равен умноженному на $\frac{2Q}{\Delta Q}$ углу вращения на длине поглощения $L_{abs} = \frac{1}{N \sigma}$ в

эксперименте на прохождение. Таким образом, можно получить усиление в $\frac{2Q}{\Delta Q} \sim 2 \times 10^6$ раз по сравнению с экспериментом прохождения через ячейку. Однако мы должны напомнить, что эксперименты с ячейкой обычно используют сильно запрещенные магнитные переходы (переходы между оболочками с различными главными квантовыми числами), так что на самом деле выигрыш получится, только если лазер также работает на запрещенных переходах. В обычном лазере, работающем на электрических дипольных переходах, требуется очень низкая инверсия населенностей для компенсации поглощения в резонаторе, так как значение σ в формуле (8) велико. Поскольку действительная часть показателя преломления также пропорциональна инверсии населенностей, согласно (6), возникает подавление. Таким образом, большинство газовых лазеров

на $E1$ переходах непригодны в качестве ловушки для измерения нарушения Р-, Т-инвариантности. Хотя не известны лазеры, работающие на сильно запрещенных магнитных переходах, лазеры на магнитных дипольных переходах все же существуют. Одним из таких примеров является химический йодный лазер, рассмотренный ниже.

Р-, Т-нечетный показатель преломления выражается через Р-, Т-нечетную поляризуемость β_{PT} атома:

$$\Delta n_{PT} = -4\pi N \beta_{PT}. \quad (9)$$

Два механизма, дающих вклады в β_{PT} , были рассмотрены в работах [5–7]. Первый механизм представляет собой интерференцию Штарковской и Р-, Т-нечетной амплитуд перехода. Величину β_{PT} в этом случае можно оценить как

$$\beta_{PT}^{mix} \sim \sum_{m,n} \frac{\langle g | H_T | m \rangle \langle m | d^j | c \rangle \langle c | d^j | n \rangle \langle n | \mathbf{dE} | g \rangle}{(\varepsilon_m - \varepsilon_c)(\varepsilon_g - \varepsilon_c + \omega + i\Gamma/2)(\varepsilon_n - \varepsilon_g)}, \quad (10)$$

где ω – рабочая частота лазера, соответствующая собственной частоте резонатора; m, n – промежуточные атомные состояния, $\varepsilon_g, \varepsilon_c, \varepsilon_n, \varepsilon_m$ – энергии атомных уровней, d^j – компоненты оператора дипольного момента атома $\mathbf{d}$ (суммирование по j подразумевается в (10) везде далее), H_T – оператор Р-, Т-нечетного взаимодействия. Переход $c \rightarrow g$ является рабочим лазерным переходом.

Зависимости поляризуемости от частоты описывается множителем $\frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2}$, где $\omega_0 = \varepsilon_c - \varepsilon_g$ – частота перехода, Γ – столкновительная ширина уровня. Чтобы учесть доплеровское уширение мы должны усреднить данный множитель по максвелловскому распределению скоростей атомов в газе. В результате данный множитель принимает вид [8]

$$\left\langle \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} \right\rangle \Rightarrow \frac{1}{\Delta_D} (g(u, v) - if(u, v)), \quad (11)$$

где $\Delta_D = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{2k_b T}{m}}$ – доплеровское уширение линии, c – скорость света, m – масса атома, k_b – постоянная Больцмана, T – температура, $v = \frac{\Gamma}{2\Delta_D}$, $u = \frac{\omega - \omega_0}{\Delta_D}$ – расстройка и

$$\frac{g(u, v)}{f(u, v)} = \frac{\text{Im}}{\text{Re}} \left\{ \sqrt{\pi} e^{-w^2} (1 - \Phi(-iw)) \right\},$$

$$w = u + iv, \quad \Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z dt e^{-t^2}.$$

Усредняя указанным образом (10), приходим к оценке:

$$\beta_{PT}^{mix} \sim \frac{\langle d \rangle^3 \mathbf{E}_z \langle H_T \rangle g(u, v)}{(\Delta \varepsilon)^2 \Delta_D}, \quad (12)$$

где $\langle d \rangle$ – типичная величина матричного элемента дипольного момента, $\Delta \varepsilon \sim Ry$ (Ry – постоянная) – характерная разность энергий атомных уровней, $\mathbf{E}_z$ – аксиальная компонента внешнего поля $\mathbf{E}$. Данная оценка β_{mix}^{PT} применима для всех видов переходов [6]: электрического дипольного, магнитного дипольного и сильно запрещенного магнитного дипольного.

Согласно второму механизму Р-, Т-нечетная поляризуемость возникает благодаря расщеплению атомных уровней в электрическом поле из-за наличия дипольного момента атома. Это приводит к следующей оценке [6]:

$$\beta_{PT}^{edm} \sim \sum_{m,n} \frac{\langle g | \mathbf{dE} | m \rangle \langle m | d^j | c \rangle \langle c | d^j | n \rangle \langle n | \mathbf{dE} | g \rangle \times}{(\varepsilon_m - \varepsilon_c)(\varepsilon_n - \varepsilon_g)} \times \mathbf{d}_{at} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \omega} \frac{1}{\varepsilon_g - \varepsilon_c + \omega + i\Gamma/2} \quad (13)$$

для сильно запрещенного магнитного перехода,

$$\beta_{PT}^{edm} \sim \langle g | \mu^j | c \rangle \langle c | \mu^j | g \rangle \mathbf{d}_{at} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \omega} \frac{1}{\varepsilon_g - \varepsilon_c + \omega + i\Gamma/2} \quad (14)$$

для магнитного дипольного перехода. Здесь μ^j обозначают компоненты магнитного момента атома, d_{at} – дипольный момент атома, который может быть оце-

нен как $d_{at} \sim \frac{\langle d \rangle \langle H_T \rangle}{\Delta \varepsilon}$. Усредняя (14), получим

$$\beta_{PT}^{edm} \sim \frac{\langle d \rangle^4 \mathbf{E}_z^3 d_{at}}{(\Delta \varepsilon)^2} \frac{1}{\Delta_D^2} \frac{\partial g(u, v)}{\partial u} \sim \frac{\langle d \rangle^5 \mathbf{E}_z^3 \langle H_T \rangle}{(\Delta \varepsilon)^3} \frac{\partial g(u, v)}{\partial u} \quad (15)$$

для сильно запрещенного магнитного перехода и

$$\beta_{PT}^{edm} \sim \langle \mu \rangle^2 d_{at} \mathbf{E}_z \frac{1}{\Delta_D^2} \frac{\partial g(u, v)}{\partial u} \sim \alpha^2 \frac{\langle d \rangle^3 \mathbf{E}_z \langle H_T \rangle}{\Delta \varepsilon \Delta_D^2} \frac{\partial g(u, v)}{\partial u} \quad (16)$$

для магнитного дипольного перехода, где $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ [18] – постоянная тонкой структуры, $\langle \mu \rangle \sim \alpha \langle d \rangle$, $\langle d \rangle \sim e a_0$, a_0 – радиус Бора.

Источниками Р-, Т-нарушения являются ЭДМ электрона и нуклона, а также Р-, Т- нечетное электрон-нуклонное взаимодействие [6]. Пока, в качестве источника, мы рассмотрим только ЭДМ электрона. Матричный элемент между атомными состояниями может быть оценен $\langle H_T \rangle \sim 150 \frac{d_e}{\langle d \rangle} \Delta \varepsilon$ [6]. Здесь предполагается, что ЭДМ атома порядка $d_{at} \sim \langle d \rangle \frac{\langle H_T \rangle}{\Delta \varepsilon} \sim 150 d_e$, где принято

во внимание, что, согласно теореме Шиффа, в нерелятивистской квантовой механике ЭДМ атома должен быть равен нулю и появляется только благодаря релятивистским эффектам [8]. Последние вносят подавляющий множитель $V^2/c^2 \sim Z^2\alpha^2$ [8], где V – характерная скорость электрона в атоме, Z – атомный номер. Однако теорема Шиффа не касается «смешивающего» механизма, поскольку ЭДМ атома целиком в нем не фигурирует. Таким образом, мы должны использовать два различных $\langle H_T \rangle$ для описания механизмов «смешивания» и «расщепления». В работе [6] мы использовали один и тот же $\langle H_T \rangle$ с релятивистским подавлением для обоих механизмов. В данной работе мы будем брать $\langle H_T \rangle \sim 150 \frac{d_e}{\langle d \rangle} \Delta \varepsilon$ для «расщепления» и $\langle H_T \rangle \sim \frac{150}{Z^2\alpha^2} \frac{d_e}{\langle d \rangle} \Delta \varepsilon$ для «смешивания».

Сечение поглощения может быть записано как

$$\sigma = \pi A \frac{c^2}{\omega^2} \frac{f(u, v)}{\Delta_D}, \quad (17)$$

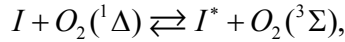
где A – коэффициент Эйнштейна для данного перехода. Угол поворота плоскости поляризации на одной длине поглощения $\frac{1}{N\sigma}$ равен

$$\phi(L_{abs}) = \frac{2\pi \omega \beta_{PT}}{c \sigma}. \quad (18)$$

Хотя не существует лазеров, работающих на сильно запрещенных переходах, известен лазер, работающий на магнитном переходе М1. Это химический йодный лазер, использующий $^2P_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ ($\lambda = 1.315$ мкм) переход [19, 20], для которого $A = 7.7 \text{ с}^{-1}$. Согласно уравнению (12), Р-, Т-нечетная поляризуемость для механизма «смешивания» записывается как $\beta_{PT}^{mix} = B_{PT}^{mix} \frac{g[u, v]}{\Delta_D}$, где

B_{PT}^{mix} определяется только свойствами атома и величиной напряженности электрического поля, но не расстройкой и уширением линии. Для атома йода вышеприведенные оценки дают $B_{PT}^{mix} = 4.5 \times 10^{-33} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ при $E = 10^4 \text{ В/см}$. Угол поворота плоскости поляризации на одной длине поглощения $\phi(L_{abs})$ и для лазерной системы в целом $\phi_{las} = \phi(L_{abs}) \frac{2Q}{\Delta Q}$ приведены в таблице.

Две первые строки соответствуют настольному йодному лазеру [21–24], использующему химическое возбуждение атомов йода синглетным кислородом:



где синглетный кислород генерируется вне лазера и затем подается в лазерную полость с парами йода. В нашем случае конструкция ввода реагента должна быть сделана максимально симметричной, чтобы избежать поперечной анизотропии активной среды.

Р-, Т-нечетная поляризуемость, угол поворота плоскости поляризации на одной длине поглощения и угол поворота плоскости поляризации для йодного лазера рассчитанные в рамках механизмов «расщепления» (вследствие ЭДМ атома) и «смешивания» ; $d_e = 10^{-30}$, $E = 10^4$ В/см, $Q/\Delta Q = 10^6$

Механизм	u	v	σ , см ²	β_{PT} , см ³	$\phi(L_{abs})$, рад	ϕ_{las} , рад
Смешивание	1	0.0021	6.7×10^{-18}	4.7×10^{-42}	2.1×10^{-19}	4.2×10^{-13}
Расщепление	1	0.0021	6.7×10^{-18}	7.8×10^{-43}	3.4×10^{-20}	6.9×10^{-14}
Смешивание	2.5	0.078	2.2×10^{-19}	1.95×10^{-42}	2.7×10^{-18}	5.4×10^{-12}
Расщепление	2.5	0.078	2.2×10^{-19}	1.2×10^{-42}	1.6×10^{-18}	3.2×10^{-12}

Лазеры данного типа работают при температуре 60–80 °С (т. е. термический дрейф аппаратуры, по-видимому, будет малым), давление синглетного кислорода $p \approx 1$ Торр, давление паров йода $p_{[I^*]} \approx 10^{-2} p$. Почти все атомы йода находятся в возбужденном состоянии, так как равновесие в данной химической реакции смещено вправо из-за большой концентрации $O_2(^1\Delta)$. Таким образом, плотность I^* составляет $N_{[I^*]} = 2.7 \times 10^{-14}$ см⁻³. Столкновительное уширение линии при давлении $p = 1$ Торр, с учетом радиуса атома йода $r_{[I]} = 0.136$ нм оценивается как $\Gamma/(2\pi) = 16 p r_{[I]}^2 / \sqrt{\pi m k_b T} = 0.7$ МГц, в то время как доплеровское уширение составляет $2\sqrt{\ln 2} \Delta_D/(2\pi) = 0.27$ ГГц. Условие лазерной генерации удовлетворяется, например, при длине полости $L = 50$ см с двумя зеркалами, имеющими коэффициент отражения $R = \exp(-\sigma N_{[I^*]} L) = 0.9$.

Желательно было бы реализовать какую-нибудь установку, работающую на сильно запрещенных переходах. Для этой цели можно рассмотреть двухсекционную систему (рис. 4), состоящую из ячейки с парами цезия в электрическом поле и усилителя. Пусть длина ячейки равна L_1 и длина усилителя L_2 . Циркулярная анизотропия существует только в ячейке, так что средний Р-, Т-неинвариантный показатель преломления можно записать как $\Delta n_{PT} \frac{L_1}{L_1 + L_2}$. Вещество

ячейки является поглощающим и дает вклад в общее поглощение (см. также приложение):

$$\frac{1}{2Q} = -\frac{\ln(R_1 T_{12}^2 R_2 e^{-2L_1/L_{abs}})}{4k(L_1 + L_2)} = -\frac{\ln(R_1 T_{12}^2 R_2)}{4k(L_1 + L_2)} + \frac{L_1}{2k L_{abs} (L_1 + L_2)}, \quad (19)$$

где T_{12} – коэффициент прохождения перегородки между усилителем и ячейкой.

Первое слагаемое $\frac{1}{2Q_0} = -\frac{\ln(R_1 T_{12}^2 R_2)}{4k(L_1 + L_2)}$ в (19) описывает потери пустого резонатора.

Угол поворота в такой двухсекционной системе имеет вид

$$\phi_{2las} \sim \Delta n_{PT} \frac{L_1}{L_1 + L_2} \left(\frac{1}{Q_0} + \frac{1}{k L_{abs}} \frac{L_1}{L_1 + L_2} \right)^{-2} \frac{1}{\Delta Q_0}, \quad (20)$$

где ΔQ_0 описывает линейную анизотропию потерь резонатора. Соответственно условие генерации имеет вид

$$2\kappa L_2 - 2L_1/L_{abs} = -\ln(R_1 R_2 T_{12}^2), \quad (21)$$

где κ – усиление на единицу длины усилителя $Q_0 = \frac{k(L_1 + L_2)}{\kappa L_2 - L_1/L_{abs}}$.

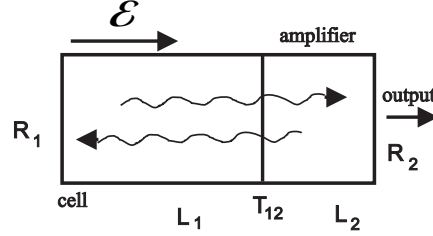


Рис. 4. Упрощенная схема двухсекционной системы

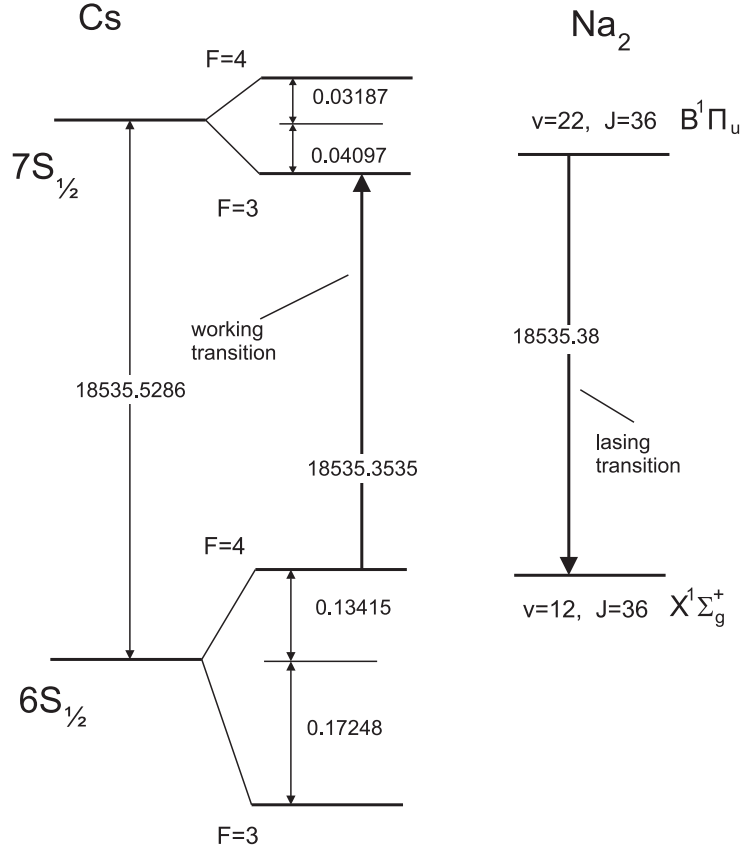


Рис. 5. Энергия рабочего перехода цезия и лазерного перехода Na_2 , cm^{-1}

Можно использовать сильно запрещенный магнитный переход в атоме цезия $6S_{1/2} \rightarrow 7S_{1/2}$, а в качестве усилителя использовать пары молекулярного натрия Na_2 . Линия 539.4 ± 0.1 нм перехода $B^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ между вибрационными уровнями Na_2 исследовалась в [26], где был обнаружен лазерный переход при накачке 472.7 нм аргоновым лазером. Рабочая полость содержала пары натрия при 820 К, $p = 11$ Торр и буферный газ (аргон) с парциальным давлением $p_{[Ar]} = 8$ Торр [26]. Давление молекулярного натрия составляло $p_{[Na_2]} \approx 0.05 p$, соответственно плотность молекул $N_{[Na_2]} \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Усиление составляло $\kappa = 0.1 \text{ см}^{-1}$. Более точно энергия этого лазерного перехода была измерена в результате спектроскопии [27] и оказалась равной 18535.38 см^{-1} .

Сверхтонкая структура перехода $6S_{1/2} - 7S_{1/2}$ цезия найдена нами компиляцией данных работ [28–30] и показана на рис. 5. Наиболее близкую энергию к лазерному переходу имеет переход между сверхтонкими компонентами $F = 4$ и $F = 3$.

Давление паров цезия при температуре $T = 820$ К составляет 27 кПа (205 Торр), так что концентрация атомов Cs равна $N = 2.4 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Столкновительное уширение линии при радиусе цезия $r_{[Cs]} = 262$ нм оценивается как $\Gamma/(2\pi) = 0.33$ ГГц. Доплеровское уширение составляет $2\sqrt{\ln 2} \Delta_D/(2\pi) = 1$ ГГц.

Таким образом, параметр $\nu = 0.28$ и расстройка $u = \frac{\omega_{[Cs]} - \omega}{\Delta_D} = 1.36$, где ω –

частота Na_2 лазерного перехода и $\omega_{[Cs]}$ – частота рабочего перехода цезия. Коэффициент Эйнштейна для перехода $6S_{1/2} \rightarrow 7S_{1/2}$ цезия во внешнем электрическом поле 10^4 кВ/см составляет $A = 0.034 \text{ с}^{-1}$. Длина поглощения равна $L_{abs} = 5$ м. Если взять $L_1 = 30$ см, $L_2 = 10$ см, то из (21) находим $Q_0 = 5 \times 10^6$, что может быть реализовано на двух одинаковых зеркалах с коэффициентом отражения

$R = \exp\left(-\frac{Q_0}{k(L_1 + L_2)}\right) = 0.34$, где T_{12} для простоты мы положили равным едини-

це. Согласно [6], постоянная $B_{PT}^{mix} = 5.8 \times 10^{-34} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$, если взять $d_e = 10^{-30} \text{ е} \cdot \text{см}$ и внешнее поле $E = 10$ кВ/см. Без релятивистского подавляющего фактора $Z^2 \alpha^2 = 0.16$ мы имеем $B_{PT}^{mix} = 3.6 \times 10^{-33} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$, что дает Р-, Т-нарушающую поляризуемость $\beta_{PT}^{mix} = B_{PT}^{mix} g(u, \nu)/\Delta_D = 7.1 \times 10^{-43} \text{ см}^3$.

Соответственно угол поворота плоскости поляризации для двухсекционной системы $\phi_{2las} = 7 \times 10^{-11}$ рад при $\Delta Q_0 = 10^{-6} Q_0$. Однако при увеличении числа границ может увеличиться остаточная анизотропия системы. В принципе можно

избежать добавочной границы, если использовать смесь газов в одной лазерной полости. Можно, например, взять натриевый лазер с насыщенными парами (205 Торр) вместо буферного газа аргона при 8 Торр. Если такой лазер не будет работать из-за тушения возбужденных состояний Na_2 атомами цезия, то можно уменьшить количество цезия. Допустим, однако, что такой лазер будет работать. Тогда при усилении $\kappa = 0.1 \text{ см}^{-1}$ и длине $L = 40 \text{ см}$ условие генерации удовлетворяется с зеркалами, имеющими коэффициент отражения $R = \exp(-\kappa L) = 0.02$ (что показывает большой резерв на случай тушения). Из уравнений (4), (9) и предыдущих оценок для плотности атомов цезия и уширения мы имеем $\phi_{las} = 2.5 \times 10^{-11} \text{ рад}$.

Отметим, что при достижимой в настоящее время экспериментальной чувствительности $10^{-8} \text{ рад}/\sqrt{\text{Гц}}$ для угла поворота [31]. При времени накопления 10^6 с (11.5 дней) мы получим величину 10^{-11} рад .

Сделаем некоторые заключения об остаточной анизотропии резонатора. Предположим, что резонатор состоит из двух идентичных зеркал и анизотропия создается анизотропией коэффициента отражения ΔR . Таким образом, мы имеем $\frac{\Delta Q}{Q} = -\frac{1}{\ln R} \frac{\Delta R}{R}$. Данное выражение указывает нам, что чем больше коэффициент отражения зеркал, тем больше $\Delta Q/Q$ при том же $\Delta R/R$. В соответствии с выражением $\phi_{las} = \Delta n_{PT} Q^2 / \Delta Q$ угол поворота плоскости поляризации лазера со смесью газов может быть переписано в терминах $\Delta R/R$ как $\phi_{las} = \Delta n_{PT} k L \frac{R}{\Delta R}$. В

двухсекционной системе мы имеем (20): $\phi_{2las} = \Delta n_{PT} k L_1 \frac{R}{\Delta R}$ при $k L_{abs} \gg Q_0$.

Эти оценки показывают, что поскольку рабочая длина резонатора L или L_1 не может быть намного увеличена, поскольку должна находиться в сильном внешнем электрическом поле, то единственной возможностью повышения чувствительности является понижение анизотропии потерь ΔR зеркал.

4. Заключение

Мы рассмотрели Р-, Т-неинвариантное вращение плоскости поляризации лазера, помещенного в продольное электрическое поле. При этом могут быть получены новые ограничения на Р-, Т-неинвариантные взаимодействия. Главными проблемами, которые нужно решить для проведения такого эксперимента, являются измерение малых углов поворота плоскости поляризации и создания резонаторов с малой остаточной анизотропией потерь. Можно предположить некоторые пути решения данных проблем. Например, резонатор может быть изготовлен из движущихся зеркал, включенных в самосогласованную схему измерений, подавляющую остаточную анизотропию с помощью подстройки.

Для понижения анизотропии зеркала можно производить из хаотически ориентированных элементов.

Можно также модулировать внешнее электрическое поле или наложить слабое магнитное поле, как это делается в лазерной магнитометрии [15], что позволит уменьшить систематические ошибки.

Подводя итог можно сказать, что использование фотонной ловушки с усилителем для измерения нарушения Р-, Т-инвариантности при современном уровне технологий (остаточная анизотропия $\frac{\Delta Q}{Q} \sim 10^{-6}$, внешнее электрическое поле 10 кВ/см, способность измерять углы поворота плоскости поляризации $10^{-11} - 10^{-12}$ рад) позволит достичь чувствительности 10^{-30} е·см для дипольного момента электрона.

5. Приложение

Как известно, условие стационарных колебаний в резонаторе можно получить полагая, что амплитуда бегущей волны за проход туда и обратно становится равной начальной амплитуде. Если, например, резонатор заполнен средой с постоянным показателем преломления n , то амплитуда бегущей волны, вышедшей из точки вблизи зеркала 1 (рис. 5) и вернувшейся в ту же точку, будет равна $\mathbf{E} = e^{-2iknL} \mathbf{E}_0$, где k – волновое число в вакууме, L – длина резонатора. Из равенства конечной амплитуды начальной следует $knL = m\pi$, где m – некоторое целое число. Отличие показателя преломления от удовлетворяющего условию стационарности на величину Δn приведет к изменению амплитуды за один проход $\Delta \mathbf{E} = -2i\Delta n k L \mathbf{E}$. Разделив данное уравнение на время прохода $T \approx 2L/c$, находим

$$\frac{d\mathbf{E}}{dt} = -i\Delta n \omega \mathbf{E}. \quad (22)$$

Данное уравнение может быть выведено более строго [9–13]. Коэффициенты отражения зеркал резонатора могут быть «размазаны» по объему резонатора добавлением к показателю преломления Δn величины

$$\frac{i}{2Q} = -\frac{i}{2} \frac{\ln(R_1 R_2)}{2kL}, \quad (23)$$

где R_1, R_2 – коэффициенты отражения зеркал. Как легко видеть, при этом за полный проход амплитуда волны помножится на $\sqrt{R_1 R_2}$. Если существует несколько областей с небольшими вариациями показателя преломления, то мы должны взять средний показатель преломления $\Delta n = \frac{L_1 \Delta n_1 + L_2 \Delta n_2 + \dots}{L_1 + L_2 + \dots}$. Ампли-

туда волны содержит две компоненты $\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$, если волна распространяется

вдоль оси z . Удобно использовать циркулярный базис $E_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}(E_x + iE_y)$,

$E_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_x - iE_y)$. В общем случае анизотропной среды и резонатора, Δn является комплексной 2×2 матрицей, которая может быть записана в $\hat{\Delta n} = (N_0 + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{N})$, где $N_0 = r_0 + ih_0$ – комплексное число, $\mathbf{N} = \mathbf{r} + i\mathbf{h}$ – комплексный вектор, $\boldsymbol{\sigma} \equiv \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ – матрицы Паули.

Определим поляризационную матрицу плотности $\rho_{ij}(t) = E_i(t)E_j^*(t)$ и параметризуем ее параметрами ξ_0 и $\boldsymbol{\xi}$ как $\rho = (\xi_0 + \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\xi})/2$. Взяв производные от матрицы плотности и заменяя $\frac{dE_j}{dt}$ с помощью (22), находим

$i \frac{1}{\omega} \frac{d\rho}{dt} = \Delta \hat{n} \rho - \rho \Delta \hat{n}^+$, что приводит к

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\omega} \frac{d\xi}{dt} &= h_0 \boldsymbol{\xi} + \xi_0 \mathbf{h} + \mathbf{r} \times \boldsymbol{\xi}, \\ \frac{1}{2\omega} \frac{d\xi_0}{dt} &= h_0 \xi_0 + (\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\xi}). \end{aligned} \quad (24)$$

Из определения матрицы плотности следует, что

$$\begin{aligned} \xi_x &= \langle \sigma_x \rangle = E_+^* E_- + E_-^* E_+, \\ \xi_y &= \langle \sigma_y \rangle = -i(E_+^* E_- - E_-^* E_+), \\ \xi_z &= \langle \sigma_z \rangle = E_+^* E_+ - E_-^* E_-, \\ \xi_0 &= \langle I \rangle = E_+^* E_+ + E_-^* E_-, \end{aligned} \quad (25)$$

где I обозначает единичную матрицу. Вместо $\boldsymbol{\xi}$ и ξ_0 введем единичный вектор

$\mathbf{O} = \frac{\boldsymbol{\xi}}{\xi_0}$, в результате чего уравнение (24) принимает вид

$$\frac{1}{2\omega} \frac{d\mathbf{O}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{O} + \mathbf{h} - \mathbf{O}(\mathbf{h} \cdot \mathbf{O}). \quad (26)$$

Для полностью поляризованного света $|\mathbf{O}| = 1$ и уравнение (26) сводится к

$$\frac{1}{2\omega} \frac{d\mathbf{O}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{O} + \mathbf{O} \times (\mathbf{h} \times \mathbf{O}). \quad (27)$$

Ориентация эллипса поляризации описывается углом ϕ , который образует его большая ось с осью x [32]:

$$\operatorname{tg} 2\phi = \frac{E_y E_x^* + E_x E_y^*}{E_x E_x^* - E_y E_y^*} = -i \frac{E_+ E_-^* - E_- E_+^*}{E_+ E_-^* + E_- E_+^*} = -\frac{O_y}{O_x}.$$

Таким образом, угол поворота эллипса поляризации равен удвоенному углу поворота вектора в плоскости $xу$, взятому с противоположным знаком. Например, при повороте $\mathbf{O}_\perp$ на угол $\left(-\frac{\pi}{2}\right)$ эллипс поляризации повернется на угол $\frac{\pi}{4}$. Поворот $\mathbf{O}_\perp$ на угол (-2π) означает, что эллипс поляризации повернется на угол π и после поворота совпадет сам с собой.

Компонента z вектора $\mathbf{O}$ равна эллиптичности лазерного излучения.

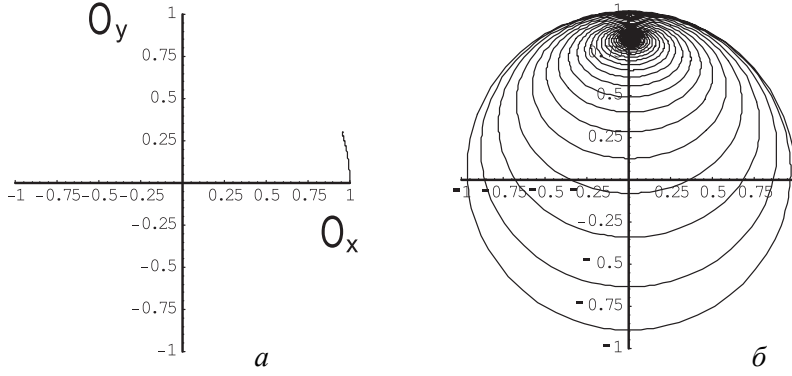


Рис. 6. Эволюция поляризации к стационарному значению при $a - \mathbf{r} = \{0.01, 0, 0.3\}, \mathbf{h} = \{1, 0, 0\}$; $b - \mathbf{r} = \{0.01, 0, 1.2\}, \mathbf{h} = \{1, 0, 0\}$

В общем случае $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) \neq 0$ поляризация всегда стремится к стационарному значению. Типичная картина эволюции показана на рис. 6. При постоянных $\mathbf{h}$ и $\mathbf{r}$ стационарное решение уравнения (26) имеет вид

$$\mathbf{O}_0 = \alpha \mathbf{r} + \beta \mathbf{h} + \gamma \mathbf{r} \times \mathbf{h}, \quad \gamma = \frac{h^2 + r^2 - \sqrt{(h^2 + r^2)^2 - 4|\mathbf{h} \times \mathbf{r}|^2}}{2|\mathbf{h} \times \mathbf{r}|^2},$$

$$\alpha = \pm \sqrt{\gamma(1 - \gamma h^2)}, \quad \beta = \pm \frac{\gamma^{3/2}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{h})}{\sqrt{1 - \gamma h^2}}. \quad (28)$$

Знак $\pm$ соответствует двум различным решениям. Одно из них является стабильным. В частном случае $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) = 0$ решение (28) упрощается:

$$\mathbf{O}_0 = \pm \frac{\sqrt{h^2 - r^2}}{h^2} \mathbf{h} + \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{h}}{h^2}, \quad |\mathbf{h}| > |\mathbf{r}|; \quad \mathbf{O}_0 = \pm \frac{\sqrt{r^2 - h^2}}{r^2} \mathbf{r} + \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{h}}{r^2}, \quad |\mathbf{r}| > |\mathbf{h}|. \quad (29)$$

Нелинейные свойства лазерной среды приводят к зависимости h_0 от $|E|^2 = \xi_0$. В этом случае мы также должны рассматривать уравнение

$$\frac{1}{2\omega} \frac{d \ln \xi_0}{dt} = h_0 + (\mathbf{h} \cdot \mathbf{O}). \quad (30)$$

Однако нелинейность этого типа не влияет на эволюцию поляризации.

Еще одним возможным типом нелинейности является так называемое «самовращение» [12], заключающееся в том, что

$$\frac{i}{\omega} \frac{d\mathbf{E}}{dt} \sim a_{sf} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E}^*. \quad (31)$$

Для E_- и E_+ мы имеем:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\omega} \frac{dE_-}{dt} &\sim \frac{i}{\omega\sqrt{2}} \left(\frac{dE_x}{dt} - i \frac{dE_y}{dt} \right) \sim \frac{a_{sf}}{\sqrt{2}} E^2 (E_x^* - iE_y^*) \sim -a_{sf} E^2 E_+^* \sim 2a_{sf} |E_+|^2 E_-, \\ \frac{i}{\omega} \frac{dE_+}{dt} &\sim -\frac{i}{\omega\sqrt{2}} \left(\frac{dE_x}{dt} + i \frac{dE_y}{dt} \right) \sim -\frac{a_{sf}}{\sqrt{2}} E^2 (E_x^* + iE_y^*) \sim -a_{sf} E^2 E_-^* \sim 2a_{sf} |E_-|^2 E_+, \end{aligned}$$

где использовано соотношение $E^2 = -2E_-E_+$. Поскольку $|E_+|^2 = \frac{\xi_0}{2}(1+O_z)$

и $|E_-|^2 = \frac{\xi_0}{2}(1-O_z)$ мы видим, что в z-компонентах $\mathbf{r}$ и $\mathbf{h}$ появляются слагае-

мые. $r_z \sim -\text{Re } a_{sf} \xi_0 O_z$, $h_z \sim -\text{Im } a_{sf} \xi_0 O_z$. Это будет приводить к вращению плоскости поляризации даже в отсутствие циркулярной анизотропии, однако это вращение не зависит от внешнего электрического поля и может быть отделено от P-, T-неинвариантного вращения модуляцией внешнего поля. К тому же эллиптичность O_z лазерного излучения, которой пропорционален эффект «самовращения», крайне мала.

Литература

1. Ellis J. R et al. // Phys. Lett. B. 2002. Vol. 528. P. 86.
2. Masina I. // Nucl. Phys. B 2003. Vol. 671. P. 432.
3. Farzan Y, Peskin M. E. // Phys. Rev. D. 2004. Vol. 70. P. 095001.
4. Regan B.C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 071805-4.
5. Baryshevsky V. G. // Phys. Lett. A 1999. Vol. 260. P. 24.
6. Baryshevsky V. G., Matsukevich D. N. // Phys. Rev. A 2002. Vol. 66. P. 062110.
7. Baryshevsky V. G., Cherkas S. L., Matsukevich D. N. // J. Phys. B. 2006. Vol. 39. P. 2467.
8. Хриплович И. Б. Несохранение четности в атомных явлениях. 1988.
9. Lamb W. E. // Phys. Rev. A. 1964. Vol. 134. P. 1429.
10. Дьяконов М. И. // ЖЭТФ 1966. Т. 49. С. 169.
11. Haeringen W. V. // Phys. Rev. 1967. Vol. 158. P. 256.
12. Алексеев А. И., Галицкий В. М. // ЖЭТФ 1969. Т. 57. С. 1002.
13. Войтович А. П. Магнитооптика газовых лазеров. 1984.
14. Bretenaker F. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 909.
15. Emil O. et al. // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 83. P. 4994.
16. Баранова Н. Б., Богданов Ю. В., Зельдович Б. Я. // УФН 1977. Т. 123. С. 349.
17. Сушков О. П., Фламбаум В. В. // ЖЭТФ. 1978. Т. 72. С. 1208.
18. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. 1989.
19. Hohla K., Kompa K. L. Handbook of chemical lasers. 1976.
20. Brederlow G., Fill E., Witte K. J. The high-power iodine laser. 1983.
21. Bernard D. J. et al. // Appl. Phys. Lett. 1979. Vol. 34. P. 40.

22. *Richardson R. J., Wiswall C. E.* // Appl. Phys. Lett. 1979. Vol. 35. P. 138.
23. *Вагин Н. П. и др.* // Квантовая электроника. 1984. Т. 11. С. 1688.
24. *Churassy S. J. et al.* // J. Physique III. 1994. Vol. 4. P. 2013.
25. *Zagidullin M. V., Nikolaev V. D.* // Proc. SPIE. 1999. Vol. 3688. P. 54.
26. *Wellegehausen B. et al.* // Appl. Phys. 1977. Vol. 13. P. 97.
27. *Camacho J. J. et al.* // J. Mol. Spectrosc. 1998. Vol. 191. P. 248.
28. *Arditi M., Carver T. R.* // Phys. Rev. 1958. Vol. 112. P. 449.
29. *Gilbert S. L., Watts R. N., Wieman C. E.* // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 27. P. 581.
30. *Weber K.-H., Sansonetti C. J.* // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. P. 4650.
31. *Cameron R. et al.* // Phys. Rev. D. 1993. Vol. 47. P. 3707.
32. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. 1988.

LASER IN AXIAL ELECTRIC FIELD AS A TOOL TO SEARCH FOR P-, T-INVARIANCE VIOLATION

V. G. Baryshevsky, S. L. Cherkas, D. N. Matsukevich*

We consider rotation of polarization plane of the laser light when a gas laser is placed in a longitudinal electric field (10 kV/cm). It is shown that residual anisotropy of the laser cavity 10^{-6} and the sensitivity to the angle of polarization plane rotation about $10^{-11} - 10^{-12}$ rad allows one to measure an electron EDM with the sensitivity about 10^{-30} e·cm.

* Joint Quantum Institute and Department of Physics, University of Maryland, USA.

О ВОЗМОЖНОСТЯХ ИССЛЕДОВАНИЯ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ЭВОЛЮЦИИ ВСЕЛЕННОЙ

В. В. Тихомиров, В. В. Малыщиц*, С. Э. Сягло, Ю. А. Целков

1. Новое научное направление – космомикрофизика

Успехи последних десятилетий в исследовании Вселенной и физики микромира привели к возникновению космомикрофизики – нового научного направления, ставящего задачи описания Большого Взрыва – зарождения и начальной стадии эволюции Вселенной на основе фундаментальных законов микромира и одновременно установления этих законов на базе данных исследования Космоса. Крупнейшим успехом космомикрофизики стало обоснование существования инфляционной стадии эволюции Вселенной [1, 2], позволившей впервые объяснить, каким образом, предположительно под действием скалярного поля, Вселенная достигла наблюдаемых размеров, массы, плотности и температуры, начав расширяться с планковских размеров $\sim 10^{-33}$ см, имея планковскую плотность $\sim 10^{-94}$ г/см³ и энергию заполняющих ее частиц $\sim 10^{28}$ эВ.

Пока, однако, не ясно, возможно ли убедиться в существовании фазы эволюции Вселенной, характеризующейся столь экстремальными характеристиками, а также проявлением дополнительных измерений пространства, убедительно предсказываемых теорией суперструн [3], достаточно основательно претендующей на роль единой теории всех взаимодействий, включая гравитацию. При этом обсуждаемые энергии частиц 10^{28} эВ столь велики, что не оставляют никаких надежд на их воссоздание рукотворным образом, и лишь исследование Вселенной дает надежду на установление фундаментальных законов физики микромира, предопределивших рождение ее самой.

Информация о наиболее ранних стадиях эволюции Вселенной и управляющих ею законах может быть донесена до нас первичными гравитационными волнами (ГВ) и черными дырами (ЧД), уникальность которых состоит в том, что, рождаясь на самых ранних этапах расширения Вселенной и запечатлевая характеристики протекающих в эту эпоху процессов, они могут быть зарегистрированы в настоящее время. Продолжавшийся несколько десятилетий процесс совершенствования детекторов ГВ увенчался созданием вступающих ныне в строй гравитационных интерферометров, которые на протяжении нескольких лет должны зарегистрировать ГВ, испускаемые при столкновении нейтронных звезд и ЧД звездного масштаба масс. Однако чувствительности, необходимой для регистрации первичных ГВ, интерферометры смогут достичь лишь после длительного усовершенствования.

2. Первичные черные дыры – уникальный источник информации о ранней Вселенной

В отличие от первичных ГВ, предсказанные в [4, 5] первичные ЧД могут проявлять себя различными способами, многие из которых делают возможным

* Физический факультет БГУ.

их поиск доступными средствами. Поэтому именно поиск первичных ЧД открывает наиболее реальную возможность получения информации о начальном этапе расширения Вселенной [6].

На самом деле систематический поиск первичных ЧД ведется с момента предсказания Хокинговского излучения [7], сыгравшего, как известно, существенную роль в изучении проблем унитарности в квантовой теории. Хокинговское излучение ЧД представляет собой поток релятивистских частиц, способных оказывать заметное влияние на состав Вселенной. Так, Хокинговское излучение, испускаемое ЧД с массами 10^9 – 10^{10} г, испаряющимися на стадии нуклеосинтеза, т. е. на 1–400-й секундах после Большого Взрыва, могло повлиять на результаты первичного нуклеосинтеза, то есть на состав вещества Вселенной. Отсутствие же подобного влияния позволяет ограничить масштаб неоднородности Вселенной на соответствующих временных и пространственных масштабах. Первичные ЧД с массами $\sim 10^{15}$ г, заканчивающие испарение в настоящую эпоху, наиболее заметно могли бы проявить себя, внося вклад в гамма-излучение и поток антипротонов.

Однако Хокинговское излучение первичных ЧД больших масс слишком слабо и практически не может быть использовано для их обнаружения. По этой причине распространенность таких ЧД лимитируется лишь плотностью материи во Вселенной, что приводит к ограничениям на 8 порядков более низким, чем ограничения на распространенность активно испаряющихся ЧД с массами, меньшими 10^{15} г [6]. При этом более строгие ограничения, чем следующие из наблюдаемой величины плотности материи во Вселенной, отсутствуют в весьма широком диапазоне масс – от 10^{16} до 10^{30} г (первичные ЧД с массами, превышающими 10^{30} г, уже могут наблюдаться методом микролинзирования).

Между тем ранние стадии космологического расширения могут приводить к возмущениям плотности, достигающих максимума в пространственных областях таких размеров, что при их коллапсе будут формироваться как раз первичные ЧД с массами, попадающими в интервал от 10^{16} до 10^{30} г. В частности, наиболее развитая теория «доинфляционной» эволюции Вселенной – pre-big bang theory [8] – предсказывает спектр возмущений плотности, нарастающий пропорционально кубу волнового вектора вплоть до некоторой величины, определяющей длины волн наиболее интенсивно возбуждаемых ГВ и масштаб масс наиболее обильно образующихся первичных ЧД. Имея в виду реальность попадания этих масс в интервал 10^{16} – 10^{30} г, возможности получения уникальной информации о рождении Вселенной были бы расширены на много порядков, если бы удалось предложить методы поиска ЧД указанных масс. Именно такие методы были предложены в наших работах [9–16]. В их основе лежит возможность обнаружения первичных ЧД путем наблюдения поглощения ими космических объектов звездного или планетарного масштаба. Главным преимуществом этого метода является то, что он наиболее эффективен именно при массах ЧД, лежащих в диапазоне 10^{16} – 10^{30} г, наименее доступном для исследований другими методами.

3. Поглощение космических объектов как способ поиска первичных ЧД

В работах [9–16] были развиты простые модели поглощения плотного излучения, заполнявшего Вселенную на ранних этапах эволюции, а также нейтронных звезд (НЗ), белых карликов (БК) и планет, позволяющие существенно расширить имеющиеся представления о возможной распространенности первичных ЧД. Построение простой теории поглощения таких плотных объектов, как НЗ, БК и некоторые планеты, включая Землю, стало возможным благодаря широкому применению модели ферми-газа для описания вещества этих объектов. В частности, нами была обоснована применимость этой модели для описания вещества Земли, сжатого и ионизованного силами тяготения в окрестности ЧД. При этом было обосновано [9] считавшееся до этого невозможным [17] присутствие в Земле одной или нескольких ЧД, массы которых должны находиться в интервале 10^{15} – 10^{16} г. Однако наиболее существенным для решения проблемы поиска первичных ЧД является возможность полного поглощения ими более крупных космических объектов.

3.1. Поглощение нейтронных звезд

Возможность полного поглощения НЗ первичными ЧД обсуждалась еще Хокингом в статье [5]. Однако процесс поглощения НЗ будет представлять практический интерес, лишь если он будет реально доступен наблюдению. Возможность наблюдения процесса поглощения НЗ на большом расстоянии была рассмотрена в [18], где утверждалось, что сжатие вещества НЗ тяготением первичной ЧД сопровождается образованием кварк-глюонной плазмы, приводящим к выделению энергии и мощному гамма-всплеску. Однако анализ [10], проведенный нами с использованием различных уравнений состояния вещества НЗ, хотя и подтвердил оценку времени поглощения НЗ [5], показал, что степень его сжатия при аккреции не превышает 5–7 раз и совершенно недостаточна для образования кварк-глюонной плазмы.

Механизм выделения энергии в сжимаемом веществе НЗ оказывается [10, 11] при этом иным, чем предполагалось в [18], и состоит в сопровождающемся испусканием антинейтрино обратном бета-распаде нейтронов. Однако интенсивное испускание антинейтрино не приводит к выделению энергии в окружающее пространство, сопоставимому с ее выделением при взрыве сверхновой. Связано это с тем, что испускание происходит в области существенно сжатия, которая, в соответствии с уравнениями аккреции, движется к ЧД со скоростью, лишь в несколько раз меньшей скорости света. Рост размеров этой области на последней стадии поглощения НЗ, на которой образуется основная часть антинейтрино, делает ее непрозрачной для антинейтрино, которые увлекаются аккрецирующим веществом внутрь ЧД, не достигая поверхности НЗ. В результате процесс поглощения НЗ первичной ЧД оказывается трудно наблюдаемым и мало пригоден для поиска ЧД.

3.2. Поглощение белых карликов первичными ЧД

В работах [12–14] было показано, что эффективный метод поиска первичных ЧД либо установления ограничений на их распространенность может быть основан на процессе поглощения БК, которые являются достаточно плотными объектами, так же как и НЗ успевающими поглотиться первичными ЧД за хаббловское время. При этом, в отличие от НЗ, поглощение БК сопровождается значительным выделением энергии, которое может быть обнаружено на расстояниях, достигающих килопарсек и более. К преимуществам БК также следует отнести значительную распространенность, простоту уравнения состояния их вещества, почти полную прозрачность последнего для нейтрино и несущественность влияния распределения аккрецирующего вещества БК на метрику.

Полученное нами время полного поглощения БК первичной ЧД с начальной массой $M_{BH}(0)$ задается выражением [14]

$$T_{abs} = \frac{\pi \hbar_3}{\sqrt{3} G^2 m'^{5/2} m_e^{3/2} M_{BH}(0)} \frac{1}{\left(x_c + \sqrt{1+x_c^2}\right)^{3/2}} = \frac{1}{\left(x_c + \sqrt{1+x_c^2}\right)^{3/2}} \frac{2.7 \times 10^9 \text{ лет}}{M_{BH}(0)/10^{16} \text{ } \mathcal{Z}} \quad (1)$$

где G и $\hbar$ – гравитационная и планковская постоянные, $m' \approx 2 \times 1.66 \cdot 10^{-24} \text{ } \mathcal{Z}$ – масса покоя ядер, приходящаяся на один электрон в углеродном БК;

$$x_c = \frac{p_F}{m_e c} \approx 0.803 \sqrt{\frac{\rho_c}{10^6 \text{ } \mathcal{Z}}}, \quad (2)$$

взятый в центральной области БК с плотностью ρ_c параметр теории вырожденного ферми-газа, $p_F \equiv \hbar \sqrt{3\pi^2 n_e}$ и n_e – ферми-импульс и концентрация электронов, c и m_e – скорость света и масса электрона. Напомним, что при $\rho_c \gg 10^6 \text{ г/см}^3$ и $x_c \gg 1$ электронный газ в БК является ультрарелятивистским, а при $\rho_c \ll 10^6 \text{ г/см}^3$ и $x_c \ll 1$ соответственно нерелятивистским. Элементарный расчет по формуле (1) показывает, что первичная ЧД с начальной массой $M_{BH}(0) \approx 10^{16} \text{ г}$ успевает поглотить БК любой плотности за хаббловское время $t_H \approx 13.7 \times 10^9 \text{ лет}$. Вычисление параметра (2) на поверхности ЧД, то есть на расстоянии $r = r_g$ от ее центра, где r_g – шварцшильдовский радиус ЧД, приводит к выражению

$$x(r_g) = \frac{p_F}{m_e c} \approx \frac{1}{2^{4/3}} \sqrt{\frac{3m'}{m_e}} \left(x_c + \sqrt{1+x_c^2}\right)^{1/2} \approx 42 \left(x_c + \sqrt{1+x_c^2}\right)^{1/2}, \quad (3)$$

позволяющему убедиться, что условие $n_e^{-1/3} \ll r_g$ применимости гидродинамического приближения, лежащего в основе используемой нами теории аккреции, тоже выполняется начиная с масс ЧД $M_{BH}(0) \approx 10^{16} \text{ г}$.

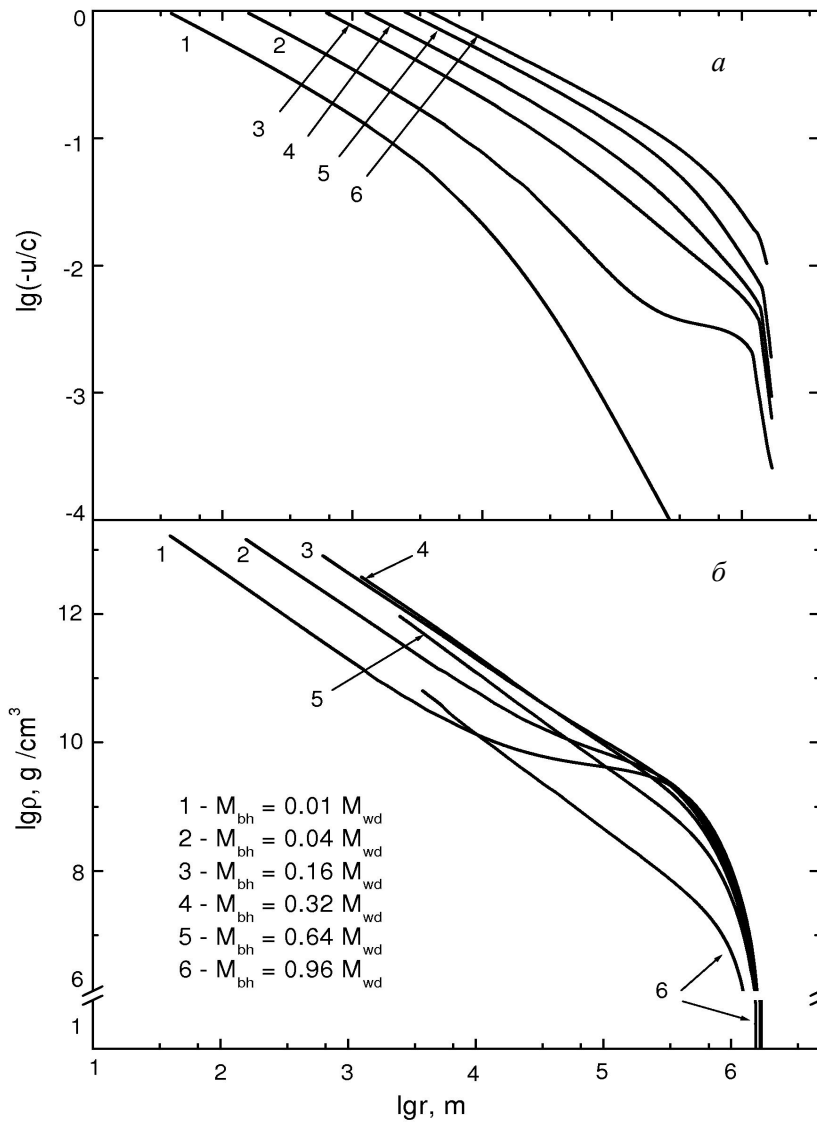
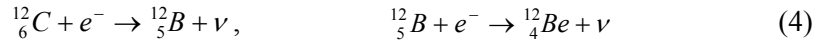


Рис. 1. Радиальные зависимости: a – скорости; b – плотности вещества БК с начальной центральной плотностью $\rho_c = 10^9 \text{ г/см}^3$ в моменты достижения массой ЧД величин 1–6, выраженных в долях исходной массы БК M_{wd}

Заметим, что благодаря вязкому торможению, приводящему к «выносу» углового момента из окрестности ЧД и обеспечивающему сохранение сферичности аккреции вплоть до масс растущих ЧД $M_{BH} \approx 10^{20} \text{ г}$, оценка (1) сохраняет высокую точность и в случае вращающихся БК.

Очевидным следствием поглощения БК будет образование ЧД с массами порядка и менее массы Солнца, недостижимыми в ходе коллапса звезд. Ввиду значительной распространенности БК, нельзя в принципе исключить, что процесс их поглощения первичными ЧД является существенным источником возникновения ЧД звездного масштаба масс. Достоверно убедиться в существовании ЧД таких масс будет, однако, не просто. Существенно более наглядным следствием поглощения БК первичными ЧД могут стать сопровождающие его нейтринные вспышки, впервые предсказанные в [10, 12].

Соотношение (3) позволяет убедиться, что даже в нерелятивистских БК энергия электронов $\varepsilon_F(r_g) \approx m_e c^2 x(r_g) > 20$ МэВ превышает равные, соответственно 13.88 и 12.17 МэВ пороги реакций нейтронизации



углерода и бора. В релятивистских же БК эта энергия достигает 100 МэВ. Поэтому аккреционное сжатие вещества углеродного БК будет сопровождаться нейтронизацией и испусканием нейтрино. Результаты моделирования коллапса, завершающего процесс поглощения БК с начальной центральной плотностью $\rho_c = 10^9$ г/см³ и массой $M_{\text{BD}} = 2.68 \times 10^{33}$ г, показаны на рис. 1. Различные кривые соответствуют моментам времени, в которые масса ЧД достигала 1, 4, 16, 32, 64 и 96 % начальной массы БК. Результаты моделирования сопровождающего коллапс нейтринного излучения представлены на рис. 2. При расчете спектра нейтрино, регистрируемых удаленным наблюдателем, мы учитывали эффекты захвата нейтрино ЧД, а также гравитационный и кинематический вклады в доплеровское смещение частоты нейтрино, основная часть которых испускается из области $r \leq 5r_g$, где все перечисленные эффекты выражены весьма ярко. На рис. 2 показано, что на протяжении почти 0.05 с интенсивность излучения превышает 10^{52} эрг/с, а полная энергия нейтринной вспышки достигает при этом 1.1×10^{51} эрг.

Расчет концентраций ядер C, B и Be показывает, что в момент максимальной интенсивности излучения (спустя 0.24 с после поглощения первого процента массы БК) практически весь углерод превращается в бор, хотя лишь немногим более 50 % последнего успевает превратиться в бериллий. Это объясняется величиной спинового множителя в выражении для вероятности нейтронизации, равного 3 для углерода и 1/3 для бора.

Число нейтрино, которое может в реальном масштабе времени зарегистрировать на расстоянии R крупнейший существующий нейтринный телескоп Суперкамиоканде, составляет примерно $300 (\text{кпс}/R)^2$. Его вполне достаточно, чтобы уверенно зарегистрировать такую нейтринную вспышку на расстоянии в несколько килопарсек. Для регистрации же ее в пределах всей Галактики необходим детектор масштаба проектируемого нейтринного телескопа Гиперкамиоканде.

Как известно, вырождение электронов приводит к «вымораживанию» электронной теплоемкости, составляющей 6/7 теплоемкости невырожденной полностью ионизированной углеродной плазмы и возрастанию примерно на порядок

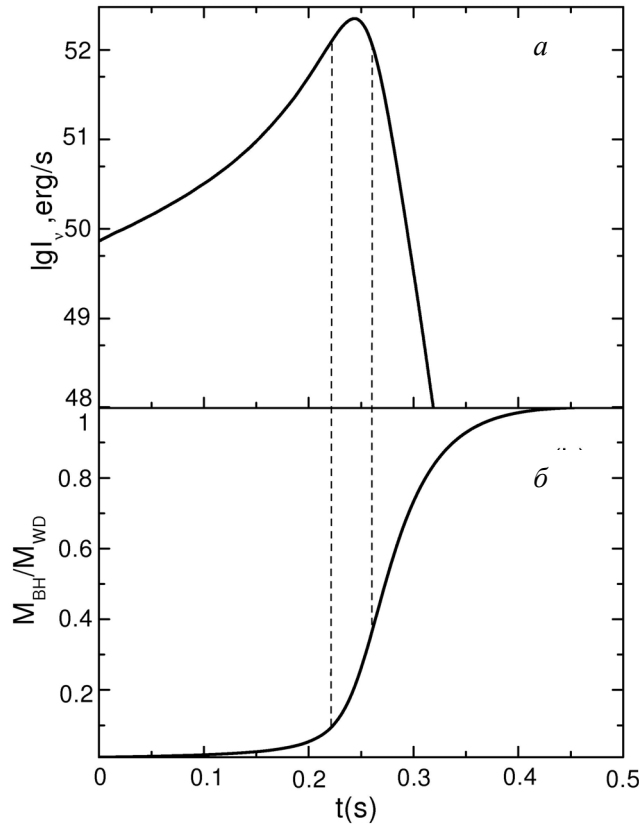


Рис. 2. Временные зависимости: *a* – интенсивности нейтринного излучения; *б* – доли начальной массы БК, поглощенной ЧД. Отсчет времени ведется от момента поглощения 1 %-ной массы БК. Центральная плотность БК в отсутствие ЧД равна

$$\rho_c = 10^9 \text{ г/см}^3$$

сечения рассеяния нейтрино в веществе плотного БК. Благодаря этим двум факторам, а также чисто геометрическому увеличению плотности нейтринного потока с уменьшением расстояния до ЧД, подобно [19], рассмотренная нейтринная вспышка вызовет взрывное горение углерода плотных вырожденных слоев БК на расстоянии вплоть до нескольких сотен километров от ЧД. Поджиг термоядерного горения должен дополнительно расширить возможности наблюдения нейтринной вспышки, сопровождающей поглощение БК, и требует дальнейшего исследования.

Помимо этого, прохождение нейтрино через верхние слои БК сопровождается нейтринными осцилляциями, открывающими новые возможности измерения углов смешивания и типа иерархии масс нейтрино [13].

3.3. Поглощение звезд III поколения

Не менее принципиальную информацию может дать поглощение звезд III поколения. Звездами III поколения (ЗПП) называют первые структурные

объекты Вселенной, формирующиеся немногим более 100 млн лет после Большого Взрыва из вещества, не претерпевшего изменений после первичного нуклеосинтеза, т. е. не обогатившееся «металлами» (любыми элементами тяжелее гелия) – продуктами жизнедеятельности звезд. Образование ЗПП принципиально важно для формирования всех структур Вселенной, поскольку именно ЗПП начинают первыми перерабатывать водород в металлы, принципиально облегчающие дальнейшее формирование звезд. Формирование же самих ЗПП протекает случайным образом в возникающих сгустках (областях повышенной плотности) с массой порядка миллиона масс Солнца. При этом в отсутствие металлов процесс формирования идет совершенно иначе, чем в случае обычных звезд, и основывается на процессе охлаждения сжимающихся сгустков вследствие излучения молекулярного водорода.

С точки зрения поиска первичных ЧД ЗПП интересны тем, что, образуясь первыми, они имеют возможность наиболее эффективно захватывать первичные ЧД, не приобретшие существенных скоростей под действием каких-либо массивных объектов [20]. Использование теории адиабатических инвариантов [20, 21] позволяет предсказать, что в процессе формирования ЗПП орбиты ЧД будут сильно сжиматься, благодаря чему ЧД будут попадать в плотные центральные области, тормозиться далее уже благодаря аккреции и передаче энергии веществу и, наконец, останавливаться в центре ЗПП. Дальнейшее поглощение вещества ЗПП первичной ЧД может привести к превращению ЗПП в массивную ЧД.

Если бы подобные события происходили достаточно часто, они бы привели к существенной модификации всего хода обогащения Вселенной металлами и формирования в ней любых структур. Предположив же, что этого не происходит, мы приходим к новому методу установления ограничений на распространенность первичных ЧД, не испускающих интенсивного Хокинговского излучения. Эффективность этого метода можно оценить на основании того, что одна первичная ЧД с массой, скажем, 10^{23} г способна достаточно быстро поглотить ЗПП с массой до 10^{36} г, открывая таким образом возможность обнаружения массовой доли первичных ЧД на уровне 10^{-13} при том, что в настоящее время [6] распространенность первичных ЧД, не испускающих интенсивного Хокинговского излучения, ограничивается лишь равной 0.25–0.30 долей темной материи в полной плотности Вселенной.

Самые последние результаты изучения последствий образования ЗПП позволяют также указать реальный путь массового захвата первичных ЧД белыми карликами. При этом, поскольку сами ЗПП являются весьма массивными звездными объектами, их эволюция никак не может приводить к образованию БК, которые образуются только при выгорании звезд солнечного масштаба масс. Об этом, в частности, говорит полное отсутствие звезд с нулевой металличностью [22]. Однако совсем недавно было показано [23], что завершающие эволюцию ЗПП взрывы не разрушают сгустков малой массы, входящих в состав большего сгустка, окружающего ЗПП. При этом малые сгустки формируются раньше большого, эффективно захватывая первичные ЧД, но не образуют звезд по причине слишком медленного охлаждения сжимающихся сгустков малой массы в отсутствие металлов. Однако обогащение металлами вещества сгустка,

окружающего проэволюционировавшую ЗПП, «включает» обычные механизмы охлаждения и открывает дорогу сжатию малых сгустков, ведущему к образованию звезд малой массы с аномально низкой, но не нулевой металличностью. Такие звезды действительно были недавно открыты [24]. При этом малость масс таких звезд обеспечивает формирование в конце их эволюции БК, а их раннее формирование – максимально возможный захват первичных ЧД, что в совокупности и делает эффективным метод поиска первичных ЧД на основе процесса их взрывного поглощения БК-ми.

4. Первичные ЧД и дополнительные пространственные измерения

Начатый еще Эйнштейном поиск путей объединения всех взаимодействий привел в последние 20 лет к созданию теории суперструн и обобщающего ее мембранного подхода, непротиворечиво формулируемых лишь в пространствах с дополнительными измерениями [3]. Существование последних должно было бы наиболее ярко проявляться на самых ранних этапах эволюции Вселенной. При этом информация о влиянии дополнительных измерений на расширение Вселенной могла запечатлеться в свойствах первичных ЧД, способных донести ее до наших дней [25, 26].

Наличие дополнительных измерений должно было привести к замедлению космологического расширения и сопутствующего ему падения плотности излучения, заполняющего Вселенную на этом этапе [25, 26]. Замедление падения плотности качественно изменяет роль аккреции по сравнению со случаем традиционной 4-мерной геометрии пространства, приводя к значительному росту масс первичных ЧД за счет поглощения излучения на стадии влияния дополнительных измерений на расширение Вселенной.

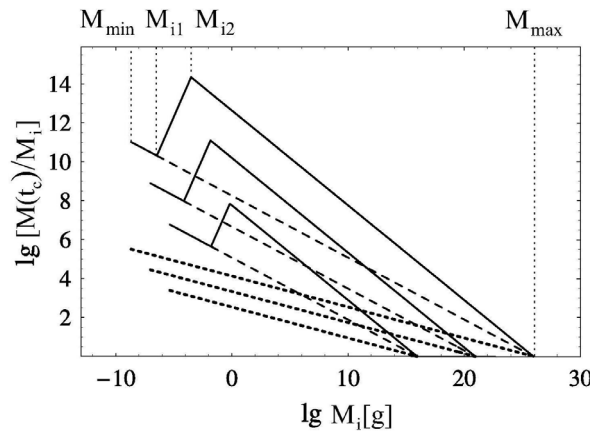


Рис. 3. Зависимость логарифма коэффициента аккреционного роста массы первичных ЧД при радиусах кривизны дополнительного измерения $l = 10^{-12}$, 10^{-7} и 10^{-3} см (снизу вверх) от логарифма начальной массы ЧД. Сплошные линии соответствуют расчету [16], а штриховые и пунктирные – расчетам работ [25, 26]

Адекватная теория аккреционного роста масс первичных ЧД в однобранной модели Рэндалл и Сундрума с одним бесконечным пространственным измерением была впервые развита в наших работах [15, 16]. Полученный там коэффициент аккреционного увеличения массы первичных ЧД на стадии проявления влияния дополнительных измерений $M(t_c)/M_i$, где M_i – начальная масса, $M(t_c)$ – масса в момент t_c завершения эпохи влияния дополнительного измерения на космологическое расширение, оказался существенно выше предсказывавшегося ранее [25, 26] (рис. 3).

Существенно, что масса, приобретаемая ЧД в результате аккреционного роста, определяет величину энергии, выделяемой ЧД при последующем Хокинговском испарении. Поскольку именно эта энергия определяет возможности обнаружения ЧД, предсказанный нами аккреционный рост массы существенно понижает доступную обнаружению долю массы Вселенной $\alpha_i = \alpha_i(M_i)$, заключенную в ЧД при рождении.

Для нахождения α_i можно воспользоваться текущим значением распространенности ПЧД:

$$\alpha(t) = \frac{\rho_{PBH}(t)}{\rho_{rad}(t)}, \quad (5)$$

где ρ_{PBH} и ρ_{rad} – плотность энергии ПЧД и плотность энергии излучения соответственно. Начальные массы сформированных к моменту времени t_i ПЧД есть

$$M_i = 16fM_4 \frac{l_4}{l} \left(\frac{t_i}{t_4} \right)^2, \quad (6)$$

где $f \sim 1$, l – радиус кривизны дополнительного измерения, а l_4 , t_4 , M_4 – четырехмерные планковские длина, время и масса. Особенностью модели RS2 является предсказание существования нестандартной высокоэнергетической фазы в ранней Вселенной [25, 26], оканчивающейся к моменту

$$t_c = \frac{t_4}{2} \frac{l}{l_4}, \quad (7)$$

во время которой масштабный фактор ведет себя как $a \sim t^{1/4}$, при этом $\rho_{rad} \sim t^{-1}$. Это ведет к значительному росту массы ПЧД:

$$M(t) = M_i \left(\frac{t}{t_i} \right)^{2F/\pi}, \quad (8)$$

где F – коэффициент аккреционной эффективности [25], отражающий специфику взаимодействия ПЧД и окружающей материи. Так, в случае бесстолкновительной аккреции $F=1$. Ранее [25, 26] значение F выбиралось на основе качественных соображений, однако в [16] было показано, что $F = 8/3\sqrt{3}$ и обосновано применение гидродинамического приближения.

После окончания высокоэнергетической фазы ПЧД испаряются, испуская Хокинговское излучение за время

$$t_{ev} \approx \frac{t_4}{0.0024g} \frac{l}{l_4} \left(\frac{M(t_c)}{M_4} \right)^2, \quad (9)$$

где g – число типов частиц, испускаемых ПЧД при температуре $T_{bh}=T_4/2\pi r_{bh}$,

где $T_4 = 10^{32}$ К – планковская температура, $r_{BH} = \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \sqrt{\frac{l}{l_4}} \sqrt{\frac{M}{M_4}} l_4$ – гравитацион-

ный радиус пятимерной ПЧД.

Факт модификации поведения пятимерной ПЧД в ранней Вселенной ведет к наблюдательным ограничениям на их распространенность в этих моделях, так как значение распространенности (5) к моменту (9) будет

$$\alpha(t_{ev}) = \alpha_i(M_i) \frac{M(t_c)}{M_i} \frac{a(t_{ev})}{a(t_i)}. \quad (10)$$

Отношение масштабных факторов при этом

$$\frac{a(t_{ev})}{a(t_i)} = \left(\frac{t_c}{t_i} \right)^{1/4} \left(\frac{t_{ev}}{t_c} \right)^{1/2}, \quad \text{если } t_{ev} < t_{eq}, \quad (11)$$

$$\frac{a(t_{ev})}{a(t_i)} = \left(\frac{t_c}{t_i} \right)^{1/4} \left(\frac{t_{eq}}{t_c} \right)^{1/2} \left(\frac{t_{ev}}{t_{eq}} \right)^{2/3}, \quad \text{если } t_{ev} > t_{eq}, \quad (12)$$

где $t_{eq} \approx 72\,600$ лет, момент равновесия вещества и излучения.

Следовательно, получая из наблюдений ограничение для массовой доли ПЧД при разных красных смещениях к моменту их испарения в разные эпохи $\alpha(t_{ev})$, можно через (10–12) восстановить искомое ограничение на начальную распространенность $\alpha(t_i)$.

Используя известные ограничения на выделение энергии первичными ЧД, испаряющимися в различные эпохи [5, 26], нами были получены зависимости величины α_i от радиуса кривизны дополнительного измерения l . Оказалось, что вопреки имевшимся ранее утверждениям, ограничения на α_i ужесточаются с ростом l . Как известно, максимальная величина $l_{\max} \approx 20$ мм ограничивается лабораторными экспериментами по поиску отклонений от закона Всемирного тяготения [27], а минимальная $l_{\min} \sim 10^{-14}$ см определяется условием совпадения времени Хокинговского испарения ЧД с моментом начала нуклеосинтеза $t \approx 1$ сек. При $l \sim l_{\min}$ нами было получено ограничение $\alpha_i \leq 10^{-17}$. Наиболее же жесткие ограничения $\alpha_i \leq 10^{-41}$ получаются при $l \sim l_{\max}$ из ограничений на спектр космического гамма-фона и степень остаточной ионизации водорода после рекомбинации (рис. 4, 5). Эти ограничения следует сравнить с ограничением $\alpha_i \sim 10^{-28}$ в четырехмерной космологии [6].

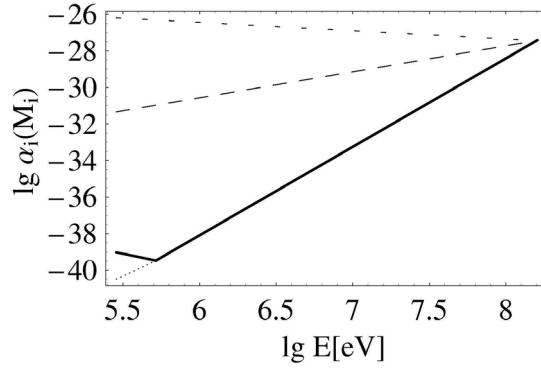


Рис. 4. Ограничения на начальную распространенность масс ПЧД в зависимости от энергии фотонов. Точечная, длинная и короткая пунктирные линии получены из коэффициента роста массы ПЧД (8) при $F = 1.54$; 1 и 0.5 соответственно

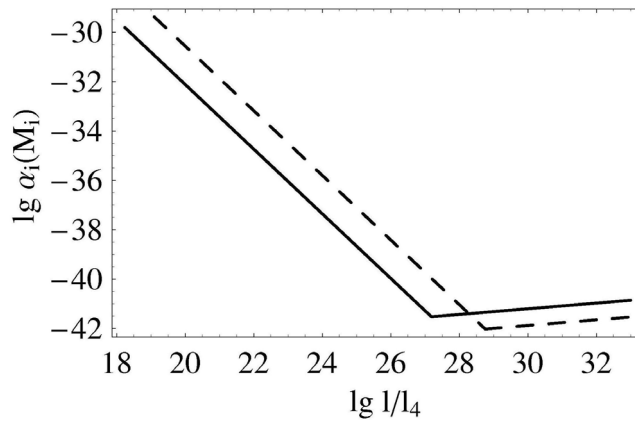


Рис. 5. Зависимость логарифма максимально допустимой начальной доли массы первичных черных дыр, полученной из ограничений на остаточную степень ионизации водорода после рекомбинации при красных смещениях $z = 1100$ – сплошная и $z = 20$ – штриховая кривые, от логарифма отношения радиуса кривизны дополнительного измерения к планковской длине $l_4 \approx 1.2 \times 10^{-33}$ см

Полученные ограничения позволяют ограничивать параметры Вселенной, имеющей дополнительное измерение, в частности, спектральный индекс спектра адиабатических возмущений плотности [28], определяющий возникновение структур во Вселенной с дополнительными измерениями.

5. Заключение

В качестве общего заключения приведем сводную таблицу результатов, где приведены данные по ограничениям на начальные распространенности ПЧД при максимальном и минимальном радиусе кривизны l , а также для значения $l = l^*$,

Ограничения при $l = l_{min}, l_{max}$ и максимальное ограничение при $l = l^*$

Источник ограничений:	$\alpha_i(l_{max})$	l_{min}/l_4	$\alpha_i(l_{min})$	l^*/l_4	$\alpha_i(l^*)$	$\alpha_i(4D)$
Полная плотность материи	-30	20	-18	30	-31	-18
Диффузионные фотоны	-39	20	-27	30	-40	-27
Избыток антипротонов	-35	20	-28	30	-36	-29
Распад дейтерия при 400 с	-27	15	-21	21	-29	-18
Распад дейтерия при 10^8 с	-29	17	-20	24	-30	-19
Распад дейтерия при 10^{13} с	-30	18	-19	27	-31	-20
Распространенность He	-27	14	-17	19	-26	-18
Спектр СМВ при $z = 2 \cdot 10^6$	-30	17	-21	24	-31	-21
Спектр СМВ при $z = 1100$	-34	18	-23	27	-34	-21
Ионизация H при $z = 1100$	-41	18	-30	27	-42	-29
Ионизация H при $z = 20$	-42	19	-29	29	-42	-29

Примечание. В таблице приведены десятичные логарифмы соответствующих величин.

соответствующего точке излома на графиках, которая означает максимальное ограничение. Там же приведены для сравнения и данные по ограничениям на основе стандартной космологии.

Из результатов таблицы видно, что наиболее жесткие ограничения накладываются измерением высокоэнергетического диффузионного фотонного фона, а также остаточными степенями ионизации водорода. С другой стороны, данные первичного нуклеосинтеза позволяют исследовать область гораздо меньших радиусов кривизны $l \simeq 10^{14} l_4$. Добавим, что еще одна важная причина, по которой не прекращаются попытки обнаружения ПЧД связана с тем, что это позволяет ограничить спектр флуктуаций плотности в ранней Вселенной, который определяет возникновение крупномасштабных структур на более поздних стадиях эволюции [29]. Так, если ПЧД формируются прямо из возмущений плотности, то доля областей, подверженных коллапсу, определяется среднеквадратическим отклонением

$$\sigma(M) \equiv \frac{\sqrt{(\delta M)^2}}{M} \quad (13)$$

флуктуаций, проникающих под горизонтом в данную эпоху. Полагая, что флуктуации имеют Гауссово распределение и являются сферически симметричными, можно заключить, что доля коллапсирующих областей массы M

$$\alpha_i(M) = \sigma(M) \exp\left(-\frac{\delta_c^2}{2\sigma^2(M)}\right). \quad (14)$$

Как хорошо известно, самые жесткие ограничения $\alpha_i \sim 10^{-28}$ для радиационно доминированной четырехмерной Вселенной, для которой $\delta_c = \gamma = p/\rho = 1/3$, следуют из измерений высокоэнергетического фона диффузионных фотонов и антипротонного избытка [29] для ПЧД, имеющих массы, порядка Хокинговской $M_H \sim 5 \cdot 10^{14} \text{ г}$. Соотношение (14) позволяет обратить это ограничение для вариации масс $\sigma(M) \leq 0.030$.

Недавние исследования [30] процесса коллапса в высокоэнергетическую эпоху модели RS2 демонстрируют, что параметр $\delta_c \sim 0.1$. Таким образом, взяв $\alpha_i \sim 10^{-40}$ можно заключить, что это приведет к более жестким ограничениям $\sigma(M) \leq 0.0076$ для вариации масс в пятимерной космологии класса RS2 по сравнению с четырехмерным результатом.

Резюмируя можно констатировать, что первичные черные дыры открывают уникальные возможности исследования ранних этапов эволюции Вселенной, позволяя получать информацию о спектре начальных возмущений плотности Вселенной и влиянии дополнительных измерений на ход космологического расширения.

Литература

1. *Линде А. Д.* Физика элементарных частиц и инфляционная космология. 1990.
2. *Kolb. E. W., Turner M. S.* The Early Universe. Frontiers in Physics, 69. 1990.
3. *Грин М., Шварц Дж., Виттен Э.* Теория суперструн. 1990. Т. 1, 2.
4. *Зельдович Я. Б., Новиков И. Д.* // Астрон. журн. 1966. Т. 43. С. 758.
5. *Hawking S. W.* // Mon. Not. Roy. Astr. Soc. 1971. Vol. 152. P. 75.
6. *Carr B. J.* // Astrophys. J. 1975. Vol. 205. P. 1; astro-ph/0504034.
7. *Hawking S. W.* // Nature. 1974. Vol. 240. P. 30.
8. *Gasperini M., Veneziano G.* // Phys. Rept. 2003. Vol. 373. P. 1; hep-th/0207130.
9. *Тухомиров В. В., Юралеви́ч С. Э.* // Изв. НАНБ. Сер. физ.-мат. наук. 2001. С. 73.
10. *Tikhomirov V. V., Yuralevich S. E.* // Two new possible mechanisms of supernova-like explosions. 2004. P. 263.
11. *Tikhomirov V. V., Yuralevich S. E.* // Proc. of Int. 7th School on Non-Accelerator Astroparticle Physics, ICTP, Trieste, Italy. 2005. P. 304.
12. *Yuralevich S. E.* // Nucl. Phys. B (Proc. Suppl). 2003. Vol. 118. P. 509.
13. *Tikhomirov V. V., Yuralevich S. E.* // Ядерная физика. 2004. Т. 67. С. 2062.
14. *Tikhomirov V. V., Siahlo S. E.* // Gravitation & Cosmology. 2005. Vol. 11. P. 229.
15. *Tikhomirov V. V., Tselkov Yu. A.* // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2005. Vol. 8:3. P. 308.
16. *Tikhomirov V. V., Tsalkou Yu. A.* // Phys. Rev. D. 2005. Vol. 72. P. 121301(R).
17. *Докучаев В. И., Волкова Л. В.* // Письма ЖЭТФ. 1994. Т. 60. С. 72.

18. Дерисhev E. B., Кочаровский B. B., Кочаровский Вл. B. // Письма в ЖЭТФ. 1999. Т. 70. С. 652.
19. Герштейн С. С. и др. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 5.
20. Derishev E. V., Belyanin A. A. // Astron. Astrophys. 1999. Vol. 343. P. 1.
21. Gondolo P., Silk J. // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. P. 1719.
22. Bromm V., Larson R. B. // Ann. Rev. Astron. Astrophys. 2004. Vol. 42. P. 79; astro-ph/0311019.
23. Susa H., Umemura M. // astro-ph/0604423.
24. Christlieb N. et al. // Nature. 2002. Vol. 419. P. 904.
25. Clancy D., Guedence R., Liddle A. R. // Phys. Rev. D. 2003. Vol. 68. P. 023507.
26. Sendouda Y. et al. // Phys. Rev. D. 2003. Vol. 68. P. 103510.
27. Smullin S. J. // Phys. Rev. D. 2005. Vol. 72. P. 122001.
28. Sendouda Y. et al. // JCAP. 2006. Vol. 0606. P. 003; astro-ph/0603509.
29. Carr B. J. // Astrophys. J. 1975. Vol. 201. P. 1; astro-ph/0504034.
30. Kawasaki M. // Phys. Lett. 2004. Vol. B591. P. 203.

ON THE POSSIBILITY OF INVESTIGATION OF THE FIRST STAGE OF THE UNIVERSE EVOLUTION

V. V. Tikhomirov, V. V. Malyshchits*, S. E. Siahlo, Yu. A. Tsalkou

The results and perspectives of investigation of both the early Universe and extra dimension problem using the methods of primordial black hole search suggested by the authors are reviewed.

Namely, it is shown that primordial black holes (PBH) with masses $M_{bh} > 5 \times 10^{14}$ g are able to absorb the most dense white dwarfs (WD) and that with masses $M_{bh} > 10^{16}$ g – any WDs for the Hubble time. WD matter absorption is accompanied by neutronization and neutrino emission which energy more than ten orders exceeds that of PBHs' Hawking radiation. The most dense WD absorption is accompanied by the neutrino burst carrying away 10^{51} erg and more for about a tenth of a second. If such a burst takes place at several kiloparsecs from the Earth it will be detected by the existing neutrino detectors with confidence. The burst mentioned could heat the WD interior to the temperatures high enough to ignite the nuclear burning giving rise to a supernova-like explosion. Both the WDs absorption by PBHs and the accompanying processes allow to improve the constraints on abundance of weakly emitting PBHs by several orders.

New astrophysical restrictions on abundance of primordial black holes (PBHs) in the Randall-Sundrum Type II braneworld cosmology are also obtained. It is shown that since particle collisions considerably increase accretion rate from the cosmological background onto 5D primordial black holes formed during the high-energy phase of the Randall-Sundrum Type II braneworld scenario. This accretion rate increase leads to new, much tighter observational constraints on initial PBH mass fraction following from critical density limit and measurements of high-energy diffuse photon background and antiproton excess for PBHs completing their Hawking evaporation at present. Comparison with other types of astrophysical constraints on PBHs abundance such as primordial nucleosynthesis, hydrogen ionization and CMB spectrum distortion for PBHs from earlier epoch is also discussed.

A new method of primordial black hole (PBH) search based on the Population III star (PIIS) absorption is proposed. A slow PBH motion in the epoch of PIIS formation makes efficient both PBH orbit contraction and further PBH deceleration leading to the population of dense PIIS regions by PBHs. The following matter absorption allows PBHs with masses $M > 10^{22}$ g to completely absorb PIISs for the time of their existence. The PIISs absorption possibility opens up a new way of PBH search or establishing new constraints on the abundance of PBHs with masses from 10^{22} to 10^{30} g.

* Department of Physics, Belarusian State University.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЗАМКНУТОЙ КОЛЛАПСИРУЮЩЕЙ ВСЕЛЕННОЙ

К. А. Веренич*, В. Л. Калашников**, С. Л. Черкас

В данной статье сравниваются два подхода к квантованию замкнутой Вселенной Фридмана. В первом подходе используется нормировка волновой функции Вселенной по Шредингеру, в то время как во втором подходе волновая функция Вселенной нормируется в стиле уравнения Клейна – Гордона, что позволяет построить зависящие от времени квазигейзенберговы операторы и найти их средние значения. Показано, что в последнем подходе вследствие квантово-механического описания среднее значение масштабного фактора Вселенной не коллапсирует до нуля, а в конце эволюции стремится к постоянному значению близкому к тому, что получается из первого подхода, в котором эволюция во времени вообще отсутствует.

Объединение квантовой механики и гравитации входит в число самых важных задач современности и является одним из аспектов развития теории струн [1]. Квантовая гравитация необходима для описания ранней Вселенной, по-

скольку считается, что на Планковских временах $\tau_p = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^5}}$ от «начала» Вселенная должна описываться квантово-механически. Впервые канонический формализм, включающий в себя волновую функцию Вселенной и ее конфигурационное пространство – суперпространство, был разработан более 40 лет назад [2, 3].

Сегодня, несмотря на успехи квантовой гравитации, по-прежнему остается множество проблем, таких как отсутствие времени, трактовка волновой функции Вселенной и построение Гильбертова пространства для физических состояний.

Для замкнутой Вселенной, кроме этого, возникает проблема коллапса: как известно, достаточно массивные тела сжимаются под действием сил гравитации, в результате чего их плотность неограниченно возрастает. То же самое относится к замкнутой Вселенной, заполненной каким-либо видом материи. Согласно общим ожиданиям, квантово-механическое описание должно снять проблему коллапса, однако окончательно устоявшегося ответа на данный вопрос пока нет. Напротив, можно отметить, что коллапс приводит к дополнительным трудностям при квантово-механическом описании, поскольку ассоциируется с потерей вероятности. Как будет видно далее, одним из способов избежать этого является допущение реколлапса, т. е. когда после коллапса система вновь начинает расширяться.

Рассмотрим решение двух проблем: проблемы времени и проблемы коллапса на примере квантово-механического описания замкнутой однородной изотропной Вселенной Фридмана в минисуперпространстве.

* Физический факультет БГУ.

** Институт Фотоники Венского технического университета, Австрия.

Эйнштейновское действие для гравитации и однокомпонентного вещественного скалярного поля (которое в данной модели представляет единственный вид материи) можно записать следующим образом:

$$S = -\frac{1}{16\pi G} \int d^4x \sqrt{-g} R + \int d^4x \sqrt{-g} \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \varphi)^2 - V(\varphi) \right], \quad (1)$$

где R – скалярная кривизна [4], $g = \det[g^{\mu\nu}]$ определитель контравариантного метрического тензора, $V(\varphi)$ – потенциал самодействия скалярного поля [5], включающий в себя космологическую постоянную.

Ограничимся рассмотрением однородной изотропной Вселенной с метрикой:

$$ds^2 = N^2(t) dt^2 - a^2(t) d\sigma^2, \quad (2)$$

где $N(t)$ – функция хода [6], описывающая свободу относительно выбора параметризации времени, $a(t)$ – масштабный фактор Вселенной (расстояние между любыми двумя точками растет со временем как $r(t) = r_0 \cdot a(t)$, где r_0 задает некоторый масштаб расстояний).

Для ограниченной метрики (2) и замкнутой Вселенной действие принимает вид:

$$S = \int N(t) \left\{ \frac{3}{8\pi G} \left(a - \frac{a\dot{a}^2}{N^2(t)} \right) + \frac{1}{2} a^3 \frac{\dot{\varphi}^2}{N^2(t)} - a^3 V(\varphi) \right\} dt. \quad (3)$$

Это действие может быть получено из следующего выражения варьированием по p_a и p_φ

$$S = \int \left\{ p_\varphi \dot{\varphi} - p_a \dot{a} - N(t) \left(-\frac{3a}{8\pi G} - \frac{8\pi G p_a^2}{12a} + \frac{p_\varphi^2}{2a^3} + a^3 V(\varphi) \right) \right\} dt, \quad (4)$$

после чего импульсы, выраженные через скорости $p_\varphi = \frac{1}{N(t)} \dot{\varphi} a^3$ и

$p_a = \frac{3}{4\pi N(t)} a \dot{a}$ должны быть снова подставлены в (4).

Варьирование действия (4) по $N(t)$ приводит к равенству нулю гамильтониана системы

$$H = -\frac{3a}{8\pi G} - \frac{8\pi G p_a^2}{12a} + \frac{p_\varphi^2}{2a^3} + a^3 V(\varphi) = 0 \quad (5)$$

на классических траекториях движения системы.

Чтобы перейти от классической теории к квантовой мы должны заменить классические импульсы соответствующими операторами, удовлетворяющими коммутационным соотношениям $[\hat{p}_\varphi, \hat{\varphi}] = -i$, $[\hat{p}_a, \hat{a}] = i$, что может быть реализовано с посредством $\hat{p}_\varphi = -i\partial/\partial\varphi$, $\hat{p}_a = i\partial/\partial a$.

Уравнение Де Витта – Уиллера $\hat{H}\psi = 0$ [2, 3], где ψ – волновая функция Вселенной, является квантовым вариантом гамильтоновой связи $H=0$.

Как можно заметить, в гамильтониане (5) присутствуют некоммутирующие операторы p_a и $1/a$ и априори неясно, каким должно быть взаимное расположение операторов. Поскольку в данном случае мы хотим нормировать волновую функцию Вселенной в стиле Шредингера $\int_0^\infty da \int_{-\infty}^\infty d\varphi \psi^* \psi = 1$, то упорядочение

операторов выбирается из соображений, чтобы волновая функция обращалась в ноль, когда масштабный фактор Вселенной равен нулю или бесконечности. Таким образом, уравнение Де Витта – Уиллера принимает вид

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{a} \frac{\partial^2}{\partial a^2} - \frac{1}{a^3} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - a + a^3 V(\varphi) \right) \psi(a, \varphi) = 0, \quad (6)$$

где приняты планковские единицы измерения $4\pi G/3=1$. Везде далее для простоты мы будем полагать $V(\varphi)=0$, что дает возможность записать решение уравнения (6) с помощью метода разделения переменных:

$$\psi_k(a, \varphi) = \sqrt{a} K_{\sqrt{1/16-k^2}/4} (a^2/2) e^{ik\varphi},$$

где $K_\lambda(z)$ – модифицированная функция Бесселя [7]. Наконец, нормированное решение уравнения (6) представляется в виде волнового пакета:

$$\psi(a, \varphi) = C \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(a, \varphi) c(k) dk,$$

где C – нормировочный множитель.

При малых a функция $\psi_k(a, \varphi)$ имеет асимптотику $\psi_k = a^{\frac{1-\sqrt{1-4k^2}}{2}} e^{ik\varphi}$ и обращается в ноль при $a=0$ только если $k \neq 0$. Это означает, что для конструирования волновых пакетов должны использоваться $c(k)$ обращающиеся в ноль при $k=0$, например $c(k) = k^2 e^{-k^2}$. Как мы видим, в данной картине имеется полностью статическая Вселенная с некоторым распределением масштабного фактора и амплитуды скалярного поля. Этот парадоксальный вывод (при том, что в настоящее время мы живем в расширяющейся Вселенной) вызывает оживленные дискуссии [8, 9, 10]. Разумеется, временная эволюция также будет отсутствовать, если проводить рассмотрение в Гейзенберговской картине. Например, домножим уравнение (6) на a и будем рассматривать оператор $\hat{H} = \hat{H}^+ = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial a^2} - \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - a^2 \right)$ как гамильтониан системы. Несмотря на то что

можно построить нетривиальные Гейзенберговы операторы $\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t}$, их средние значения не эволюционируют со временем. Действительно, для среднего значения производной имеем

$$\langle \psi | \dot{\hat{A}}(t) | \psi \rangle = i \langle \psi | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle =$$

$$= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (\hat{H}^+ \psi)^*(a, \varphi) \hat{A} \psi(a, \varphi) d\varphi da = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty (\hat{H}^- \psi(a, \varphi))^* \hat{A} \psi(a, \varphi) d\varphi da = 0.$$

Существенным здесь является то, что мы можем перебрасывать содержащиеся в гамильтониане операторы дифференцирования налево с помощью интегрирования по частям, поскольку волновая функция обращается в ноль на пределах интегрирования.

Предположим теперь, что поскольку уравнение Де Витта – Уилера похоже на уравнение Клейна – Гордона, то волновая функция также должна быть нормирована в стиле Клейна – Гордона. В этом случае естественно выбирать упорядочение операторов в виде лапласиана

$$\left(\frac{1}{2a^2} \frac{\partial}{\partial a} a \frac{\partial}{\partial a} - \frac{1}{2a^3} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{a}{2} \right) \psi = 0, \quad (7)$$

так, чтобы асимптотика решения при малых a была подобна плоской волне: $\psi_k(a, \varphi) = a^{\pm i|k|} e^{ik\varphi}$. Нормировка решений в стиле Клейна – Гордона выглядит следующим образом [10, 11, 12]:

$$\langle \psi, \psi \rangle = ia \int (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial a} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial a}) \Big|_{a=0} d\varphi = 1,$$

где интегрирование ведется по переменной φ в плоскости $a = 0$. При этом функция ψ должна быть построена в виде волнового пакета из отрицательно-частотных решений $\sim a^{-i|k|} e^{ik\varphi}$.

$$\psi(a, \varphi) = \int \psi_k(a, \varphi) c(k) dk. \quad (8)$$

Поскольку теперь волновая функция неограничена по a , то отсутствие временной эволюции в Гейзенберговой картине не может быть доказано вышеупомянутым способом, что дает возможность предположить существование некоторой зависящей от времени картины (подобной картине Гейзенберга), которая соответствует нормировке волновой функции в стиле Клейна – Гордона. Такая картина, состоящая в квантовании уравнений движения, предложена в [11, 12], где постулируются дираковские коммутационные соотношения для квазигейзенберговских операторов в начальный момент времени $t = 0$. Согласно [11, 12], операторные уравнения движения

$$\ddot{\hat{a}} = -\frac{\dot{\hat{a}}^2}{2\hat{a}} - \frac{3\hat{p}_\varphi^2}{2\hat{a}^3} - \frac{1}{2\hat{a}}, \quad \dot{\hat{a}} = \frac{\hat{p}_a}{\hat{a}}, \quad \dot{\hat{\varphi}} = \frac{\hat{p}_\varphi}{\hat{a}^3}, \quad \dot{\hat{p}}_\varphi = 0. \quad (9)$$

должны быть решены с начальными условиями, удовлетворяющими гамильтоновой связи

$$-\frac{(\hat{p}_a(0))^2}{2\hat{a}(0)} + \frac{(\hat{p}_\varphi(0))^2}{2(\hat{a}(0))^3} + \frac{\hat{a}(0)}{2} = 0:$$

$$\hat{a}(0) = const = a, \quad \hat{\varphi}(0) = \varphi, \quad \hat{p}_a(0) = \frac{|\hat{p}_\varphi|}{a}, \quad \hat{p}_\varphi(0) = \hat{p}_\varphi,$$

где $\ddot{p}_\phi = -i\partial/\partial\phi$. Решение уравнений движения удобнее всего искать в импульсном представлении переменной ϕ , где $\hat{p}_\phi = k$, $\hat{\phi} = i\frac{\partial}{\partial k}$. Окончательно, если положить $\hat{a}(0) = \text{const} = 0$, то решение уравнений движения (9) для $\hat{a}(t)$ находится в параметрической форме:

$$\begin{aligned} a(\eta, k) &= k^{1/2} \sqrt{\frac{(1 - \cos(4\eta))}{2}}, \\ t(\eta, k) &= 2^{-\frac{9}{4}} \sqrt{k} \int_0^{4\eta} (1 - \cos(\xi))^{\frac{1}{4}} d\xi. \end{aligned} \quad (10)$$

В импульсном представлении формула для вычисления средних значений операторов [11, 12], выведенная из нормировки волновой функции Вселенной в стиле Клейна – Гордона, выглядит подобно обычной квантовой механике:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \int a^{i|k|} c^*(k) \hat{A}(k, a, t) a^{-i|k|} c(k) \big|_{a \rightarrow 0} dk. \quad (11)$$

С помощью (10), (11) мы можем вычислить среднее значение масштабного фактора Вселенной и его дисперсию, например, для состояния Вселенной, задаваемого волновым пакетом $c(k) = k^2 e^{-k^2}$.

Результаты расчета представлены на рис. 1. Как мы видим, среднее значение масштабного фактора после стадии расширения начинает уменьшаться на стадии коллапса. Однако из графика видно, что он не обращается в нуль. Последующий коллапс имеет меньшую амплитуду и в конце концов эволюция масштабного фактора затухает. Интересно, что асимптотическое значение, к которому приходит масштабный фактор, близко к значению, найденному в полностью статической Шредингеровской картине (в расчетах использовался один и тот же волновой пакет).

Отметим, что в нашей модельной задаче эволюция Вселенной заканчивается на планковских временах. В принципе расширение может быть увеличено, если задать волновой пакет с большей кинетической энергией, однако в настоящее время считается, что экспоненциальное расширение Вселенной возникает из-за потенциала скалярного поля. Согласно [5], существует множество Вселенных, в которых начальное значение скалярного поля распределено некоторым образом. То есть Вселенные, в которых величина поля достаточна для быстрого расширения (инфляции), эволюционируют подобно нашей Вселенной, в то время как Вселенные с малым значением скалярного поля коллапсируют. В этом смысле можно считать, что данная работа описывает судьбу таких «неразвившихся» Вселенных, которые после нескольких коллапсов и реколлапсов переходят в статическое состояние, которое можно трактовать как исчезновение времени.

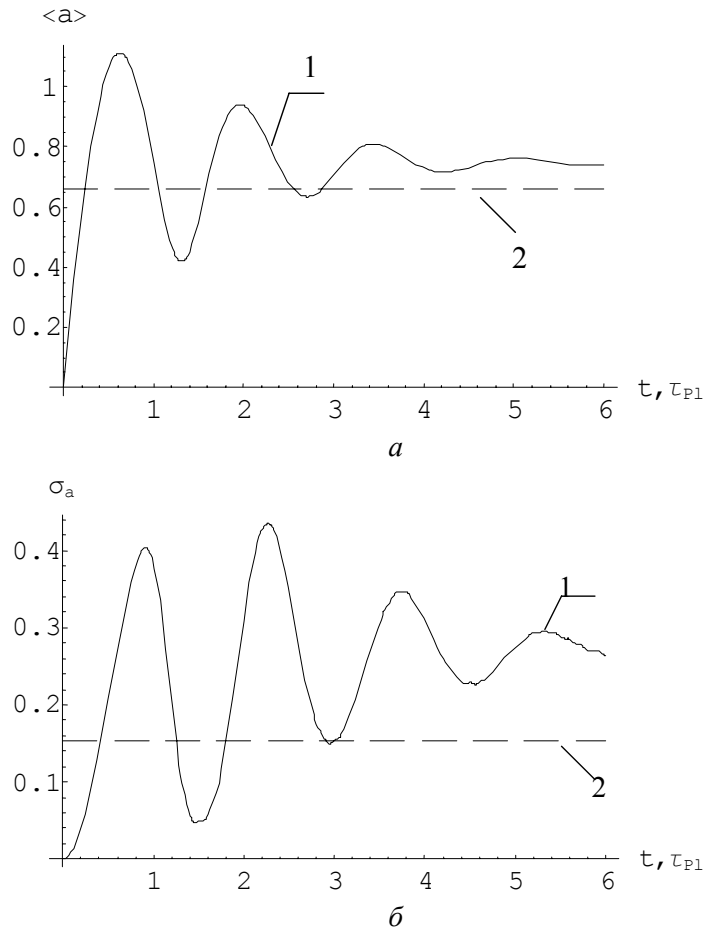


Рис. 1. Эволюция $\langle a(t) \rangle$, рассчитанная в квазигейзенберговой картине для волновой функции, нормированной по Клейну – Гордону (1) с $c(k) = k^2 e^{-k^2}$ (a). Штрихами показано значение $\langle a \rangle$ для волновой функции, нормированной по Шрёдингеру (2).

То же самое для эволюции дисперсии масштабного фактора (б)

Для описания реальной Вселенной необходимо квантовое рассмотрение инфляции, т. е. потенциала скалярного поля (напомним, что в данной работе потенциал скалярного поля полагался равным нулю). Решение операторных уравнений движения в этом случае сильно усложнится. Однако, кроме этого, имеется также принципиальная проблема. Согласно [11], на временах $t \sim 1/m$, во время рождения частиц материи (подразумевается, что их характерная масса m) происходит процесс «самоизмерения», когда масштабный фактор проецируется к разным значениям в разных пространственных областях, дальнейшую эволюцию которых можно описывать классически. Современная Вселенная представляет собой одну из таких расширившихся областей. Проблема состоит в том, что для описания процесса «самоизмерения» пространственно однородной модели недостаточно.

Таким образом, в квазигейзенберговой картине мы описали квантовую эволюцию однородной замкнутой Вселенной, состоящую в постепенном затухании коллапсов, причем среднее значение масштабного фактора не обращается в ноль.

Интересно отметить также появление стрелы времени (см. в этой связи [13]) в квазигейзенберговой картине замкнутой Вселенной, направленной в сторону затухания эволюции и стремления к статическому миру. Данная стрела времени возникла как результат соединения гравитации и квантовой механики. Напомним, что в эволюции классической замкнутой Вселенной стрела времени отсутствует, поскольку коллапсы и реколлапсы симметричны относительно замены t на $-t$. Стрела времени также отсутствует и в квантовой механике, т. е. в уравнении Шредингера, поскольку после замены t на $-t$ и комплексного сопряжения уравнение Шредингера переходит само в себя¹.

Литература

1. Каку М. Введение в теорию суперструн. 1991. С. 6.
2. Wheeler J. A. // Battelle Recontres. 1968. P. 242.
3. DeWitt B. S. // Phys. Rev. 1967. Vol. 160. P. 1113.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. 1988. С. 339.
5. Линде А. Д. Физика элементарных частиц и инфляционная космология. 1990. С. 57.
6. Альтигулер Б. Л., Барвинский А. О. // УФН. 1996. Т. 166. С. 490.
7. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы рядов интегралов и сумм. 1962. С. 965.
8. Vilenkin A. // Phys. Rev. 1989. Vol. 39. P. 1116.
9. Isham C. J., Butterfeld J. // arXiv: gr-qc/9901024.
10. Shestakova T. P., Simeone C. // Grav. Cosmol. 2004. Vol. 10. P. 161; ibid. 2004. Vol. 10. P. 257.
11. Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. // arXiv: gr-qc/0512107.
12. Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. // Grav. Cosmol. 2006. Vol. 12. P. 126.
13. Kiefer C., Zeh H. D. // Phys. Rev. D. 1995. Vol. 51. P. 4145.

QUANTUM MECHANICS OF A CLOSED COLLAPSING UNIVERSE

K. A. Verenich*, V. L. Kalashnikov**, S. L. Cherkas

Two approaches to the quantization of the minisuperspace model of a closed Friedman Universe are compared. In the first one Schrödinger normalization of the wave function of the Universe is used, and in the second one the wave function of the Universe is normalized in the style of the Klein-Gordon equation.

The last approach allows construction of the time-dependent quasi-Heisenberg operators and finding their mean values. It is shown that in this quasi-Heisenberg picture mean value of the Universe scale factor does not collapse to zero, and, besides tends to some constant value at the end of the Universe evolution. It is interesting to note that this value is close to that obtained in the first approach where any evolution in time is absent.

¹ Следует отметить, что стрелу времени необязательно соотносить с (не-) инвариантностью уравнений относительно $t \rightarrow -t$. В статистической физике и нелинейной динамике достаточно общие начальные условия дают вполне характерную асимптотику во времени, что также можно назвать стрелой времени.

* Department of Physics, Belarusian State University.

** Institute of Photonics, Technical University of Wien, Austria.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА ЧАСТИЦ И ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ ВОЛЬФРАМАТА СВИНЦА ДЛЯ ТОЧНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ КАЛОРИМЕТРИИ НА УСКОРИТЕЛЯХ С ВЫСОКОЙ СВЕТИМОСТЬЮ

М. В. Коржик, В. А. Качанов*, А. Н. Анненков,
О. В. Мисевич, А. А. Федоров**

1. Введение

Разработка новых экспериментов на планируемых в 80-х гг. прошлого века к постройке ускорителях с высокой светимостью в СССР (УНК), США (SSC) и ЦЕРНе (LHC) потребовала с очевидностью создания новых технологий как в системах сбора данных, так и в конструкционных материалах для детекторов. Одной из наиболее очевидных проблем оказалось отсутствие радиационно-стойкого сцинтилляционного материала, сочетающего высокую тормозную способность и быстродействие для долговременной эксплуатации в интенсивных радиационных полях. В конце 80-х гг. сформировались три направления работ. Первое, развиваемое в рамках программы SSC, основывалось на разработке кросс-люминесцентных сцинтилляторов, в частности BaF_2 . Были получены обнадеживающие результаты по выращиванию крупногабаритных кристаллов, однако технология радиационно-стойких кристаллов так и не была создана вследствие закрытия проекта. В рамках проекта LHC была открыта междисциплинарная интенсивная научно-исследовательская работа RD18, вылившаяся в дальнейшем в создание отдельной исследовательской коллаборации «Crystal Clear», которая провела достаточно подробные исследования широкого круга как активированных, так и самоактивированных люминесцентных неорганических соединений. Выбор был сделан в пользу CeF_3 , самоактивированного сцинтиллятора. Однако, несмотря на приложенные усилия, технология крупногабаритных и радиационно стойких кристаллов фторида церия так и не была разработана, работы были свернуты в 1995 г. Отдел экспериментальной физики ИФВЭ, возглавляемый академиком Ю. Д. Прокошкиным, организовал в рамках подготовки УНК методическую работу по новым материалам и конструкционным решениям для электромагнитной калориметрии. Поскольку в то время материальное обеспечение было уже ограниченным, предпочтение на начальном этапе было отдано не широкой поисковой работе, а выработке технических требований к сцинтилляторам и выделению классов материалов, соответствующих этим требованиям.

* ИФВЭ, Протвино.

** Технический университет стали и сплавов, Москва.

В начале 90-х гг. высвободилось много высококвалифицированных групп из институтов, ранее занятых исследованиями по специальным тематикам. К работам была привлечена группа молодых исследователей НИИ ЯП (Минск, Беларусь), а также многочисленные организации, занимавшиеся синтезом неорганических соединений, как ВНИИСИМС (Александров), НИИ «Монокристаллов» (Харьков), НИИ «Полюс» (Москва), «Карат» (Львов) и др. Анализ и предварительные исследования показали, что наиболее перспективным классом материалов являются вольфраматы. Явным контраргументом являлось то, что среди тяжелых соединений вольфрамов были уже обнаружены и активно использовались материалы с медленно затухающими сцинтилляциями в микросекундном диапазоне как CaWO_4 , CdWO_4 , ZnWO_4 , что полностью исключало их использование в новых экспериментах. Однако в результате проведенных исследований среди вольфрамов были установлены соединения, $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$ и PbWO_4 , с потупенной собственной люминесценцией, обуславливающей быстрые сцинтилляции в наносекундном диапазоне. Результаты были опубликованы в работе [Baryshevsky V. G., Korzhik M. V. et al. // NIM. 1992. Vol. A322. P. 231], открывшей дорогу вольфрамам в физику высоких энергий и ставшей классической. В дальнейшем из-за технологических проблем работы по разработке $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$ были свернуты, а работы по созданию технологии кристаллов вольфрамата свинца PbWO_4 получили активное развитие.

2. Первые тесты кристаллов вольфрамата свинца

Кристалл вольфрамата свинца, на котором были впервые измерены сцинтилляционные свойства этого материала, был получен в НИИ «Монокристаллов» в 1990 г. и изучен в НИИ ЯП. Никто не мог представить, что у этого желтоватого (рис. 1), в общем-то невзрачного кристалла, большое будущее. Первый сцинтилляционный элемент кристалла вольфрамата свинца, содержащий более 10 радиационных длин X_0 , то есть пригодный для тестов на пучках ($20 \times 20 \times 120 \text{ мм}^3$), был изготовлен из кристалла, выращенного в Институте «Монокристалл», г. Харьков (Украина) в начале 1991 г. Он был всесторонне изучен в ИФВЭ на пучках электронов канд. физ.-мат. наук В. А. Качановым (ныне д-р. физ.-мат. наук, вед. научн. сотр.), и данные были представлены широкой научной общественности в ЦЕРНе и международной конференции CRYSTAL 2000, Chamoni, 1992 г. Резонанс научной дискуссии был столь велик, что стало очевидным – у материала есть будущее. Встал вопрос о разработке лабораторной технологии производства кристаллов для обеспечения тестов сцинтилляционными элементами.

Проанализировав все возможности внедрения этого кристалла в промышленность, эксперты ИФВЭ и НИИ ЯП остановились на Богородицком заводе техно-химических изделий (БЗТХИ), с которым в конце 1992 г. был заключен договор на производство первых элементов электромагнитного калориметра из вольфрамата свинца. Уже в марте 1993 г. были изготовлены около 10 ячеек, тесты которых на ускорителе ИФВЭ подтвердили, что материал PbWO_4 обладает уникальной комбинацией свойств – высокой плотностью, быстро затухающими сцинтилляциями в удобном для фотоприемников спектральном диапазоне,



Рис. 1. Первый сцинтилляционный кристалл
вольфрамата свинца

удовлетворительной прозрачностью. Работы по созданию технологии и ее совершенствованию, доведению до уровня спецификации экспериментов на ЛНС возглавили молодые физик из НИИ ЯП канд. физ.-мат. наук М. В. Коржик (ныне д-р физ.-мат. наук, зав. отделом) и технолог А. А. Анненков, канд. техн. наук, ставший впоследствии техническим директором завода БЗТХИ. Вплоть до 1996 г. ИФВЭ осуществлял методическое руководство и испытания макетов электромагнитных калориметров на основе вольфрамата свинца на ускорителях ИФВЭ и ЦЕРНе, а со вступлением института в коллаборацию CMS сделал весь научный задел достоянием коллаборации. В конце 1993 г. ИФВЭ заключил контракт с Богородицким заводом технохимических изделий на разработку лабораторной технологии и производство около 300 сцинтилляционных кристаллов из PWO для макета калориметра. Завод, ранее бывший флагманом электронной промышленности и основным поставщиком кристаллов ниобата и танталата лития, лишившись основных потребителей в СНГ, находился на грани банкротства. Этот и последующие контракты ИФВЭ спасли его от неминуемой остановки и перепрофилирования. Всего в течение 1993–1995 гг. ИФВЭ выплатил по контрактам БЗТХИ около 400 тыс. долл. США. Это позволило заводу сохранить высокие технологии и, по существу, выжить в очень тяжелых условиях начала 90-х гг. в России.

В 1993–1994 гг. в ЦЕРНе на канале Н8 были проведены тесты макета калориметра, состоящего из 60 ячеек PWO, коллаборацией институтов ИФВЭ, НИИ ЯП и LAPP (France) при поддержке коллаборации ALICE. Костяк команды составили эксперты коллаборации ГАМС, применение богатого опыта которых и предопределило успех испытаний. Результаты оказались столь впечатляющими, что руководство коллаборации CMS вынуждено было полностью пересмотреть концепцию экспериментальной установки и в сентябре 1994 г. принять сцинтиллятор вольфрамата свинца в качестве основы для электромагнитного калориметра.

3. Детекторные свойства кристаллов вольфрамата свинца

PWO – очень плотное вещество ($\rho = 8.28 \text{ г/см}^3$) с наименьшей, среди известных синтетических кристаллов, радиационной длиной ($X_0 = 0.89 \text{ см}$). Его радиус Мольера (R_M) составляет около 20 мм, что обеспечивает небольшие поперечные размеры электромагнитного ливня и высокую точность измерения координат фотонов (электронов). Свойства кристалла в сравнении со свойствами других сцинтилляторов, применяемых в электромагнитной калориметрии, приведены в таблице.

Свойства сцинтилляционных материалов для электромагнитной калориметрии

Материал	$\rho, \text{ г/см}^3$	$X_0, \text{ см}$	Выход, фот/МэВ	$\tau_{\text{сц}}, \text{ нс}$	$\lambda_{\text{сц}}, \text{ нм}$
PbWO ₄	8.28	0.89	200	6	420
Bi ₃ Ge ₄ O ₁₂	7.13	1.12	8200	300	505
CsI	4.51	2.43	16800	10	310
CeF ₃	6.16	1.77	4500	30	330
BaF ₂	4.88	2.03	1430 9950	0.6 620	220 310

Энергетическое разрешение PWO калориметра уже при энергии около 30 ГэВ выходит на уровень 0.5 %, а при энергии 1 ГэВ оно менее 2 %.

Точность измерения координат электромагнитного ливня для PWO калориметра лучше 0.5 мм. Сегодня это самая высокая точность, достигнутая в электромагнитной калориметрии при высоких энергиях.

Ливни в тяжелых кристаллах в два раза уже, чем в свинцовом стекле. Из опыта разделения ливней в ГАМС следует, что два фотона (электрона) могут быть надежно разделены в PWO калориметре, при расстоянии между ними около 15 мм. Эта величина критична для экспериментов ALICE и CMS из-за высокой загрузки детекторов частицами.

Первый спектрометр гамма-квантов, состоявший из 150 гексагональных кристаллов PWO, был изготовлен в 1995 г. в рамках подготовки эксперимента НЕПТУН на УНК, совместно с экспериментом ГАМС и размещен в центре гамма-детектора ГАМС-2000 в ИФВЭ. Цель создания – измерение физических характеристик детектора на PWO в реальном эксперименте. Это был последний эксперимент академика РАН Юрия Дмитриевича Прокошкина, который уделял огромное внимание этому новому направлению в электромагнитной калориметрии.

4. Методические исследования кристаллов вольфрамата свинца

При измерениях энергетического и координатного разрешений в области энергии электронов 1–45 ГэВ были получены рекордные для данных кристаллов результаты:

$$\sigma(E)/E = 1.8 \text{ \%}/\sqrt{E} + 0.3 \text{ \%}$$

При энергии 27 ГэВ координатное разрешение $\sigma(x)$ составило 250 мкм на границе двух кристаллов, что соизмеримо с разрешением современных дрейфовых камер. Были проведены также систематические исследования радиационной

стойкости кристаллов при их облучении электронами и адронами, а также потоком со смешанным спектром частиц, включавшим заряженные адроны, нейтроны и γ -кванты. Два кристалла были облучены до 3 Мрад, с мощностью дозы 100 крад/час. Оказалось, что при потере до половины света сцинтилляций за счет индуцированного радиацией поглощения центров окраски, энергетическое разрешение ухудшилось всего на 20–30 %.

Учитывая, что температурная зависимость выхода сцинтилляций в кристалле имеет коэффициент 2 % / $^{\circ}$ C в относительно большом интервале температур, открывается техническая возможность увеличения выхода сцинтилляций за счет понижения его температуры при условии сохранения временного спектра высвечивания сцинтилляций. При температуре несколько ниже 0 $^{\circ}$ C для таких кристаллов достижимым является световыход 80 фэ/МэВ, а 95 % света импульса сцинтилляций высвечивается за время менее 100 нс. На рис. 2 приведены результаты измерения энергетического разрешения при регистрации γ -квантов, полученные с помощью матрицы 3 $\times$ 3, составленной из кристаллов с улучшенным выходом сцинтилляций с размерами 20 $\times$ 20 $\times$ 200 мм при T = 253 К. Дальнейшее охлаждение кристалла приводит к перераспределению высвеченной светосуммы в пользу медленной компоненты и является нецелесообразным.

Полученное энергетическое разрешение в зависимости от энергии аппроксимируется выражением $\frac{\sigma}{E} = \frac{0.95\%}{\sqrt{E}} + 0.907\%$, где энергия γ -квантов выра-

жена в ГэВ. Полученное временное разрешение составило 130 пс для энергий γ -квантов более 25 МэВ. Полученные результаты дают основание утверждать, что сцинтилляционный кристалл вольфрамата свинца при его охлаждении в детекторе до оптимальной температуры позволяет получать энергетическое и временное разрешение лучше, чем с кристаллами CsI и сравнимое с результатами, полученными с кристаллами BF₂ и BGO. Это открыло широкие возможности для применения сцинтилляционного кристалла вольфрамата свинца в экспериментах по физике низких и средних энергий.

В дополнение к экспериментам на LHC, CMS и ALICE, в настоящее время в мире, в различных научных центрах, готовятся следующие эксперименты, где электромагнитные калориметры делаются на основе кристаллов вольфрамата свинца.

Эксперимент коллаборации MECO в лаборатории AGS в Брукхейвенской национальной лаборатории (США), который нацелен на поиск нарушения симметрии при преобразовании мюонов в электроны в поле ядра. Электромагнитный калориметр установки состоит из 2300 кристаллов с размерами 30 $\times$ 30 $\times$ 120 мм³.

Эксперимент коллаборации PrimEx в национальной лаборатории им. Джефферсона (США) нацелен на измерение с высокой точностью времени жизни π^0 через эффект Примакова и будет использовать 1200 PWO кристаллов с размерами 20.5 $\times$ 20.5 $\times$ 180 мм³.

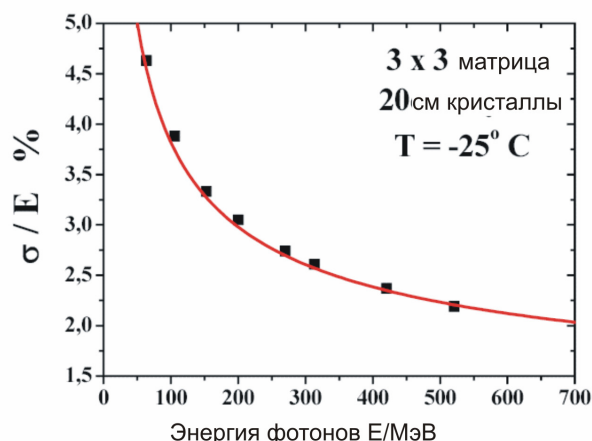


Рис. 2. Зависимость энергетического разрешения при регистрации γ -квантов, полученное с помощью матрицы 3×3 , составленной из кристаллов с размерами $20 \times 20 \times 200$ мм, $T = 253\text{K}$

В эксперименте коллаборации PANDA на многофункциональном детекторе на накопительном антипротонном кольце в GSI (Германия) будет использовано 18000 PWO кристаллов с размерами $27 \times 27 \times 200$ мм³.

Рассматривается возможность применения кристаллов вольфрамата свинца на перспективных ускорителях SLHC и ILS, однако это потребует интенсивной НИР по совершенствованию радиационной стойкости кристаллов до уровня менее $0.1\text{м}^{-1}/100$ крад.

Монокристалл вольфрамата свинца является перспективным сцинтилляционным материалом для применения в экспериментах по физике частиц высоких энергий. По совокупности параметров является оптимальным для применения в электромагнитной калориметрии на коллайдерах с большой светимостью и высокой частотой столкновения пучков. Применение сцинтиллятора вольфрамата свинца позволяет создавать компактные однородные быстродействующие электромагнитные калориметры с удовлетворительным энергетическим разрешением в диапазоне энергий регистрируемых γ -квантов от 50 МэВ.

Результаты исследований описаны экспертами ИФВЭ, НИИ ЯП и их коллаборантами в более чем 200 научных статьях и сборниках, 2 монографиях. По результатам исследований защищены 3 докторских и 8 кандидатских диссертаций.

5. Технология производства кристаллов вольфрамата свинца

Свойства PWO существенно определяются технологией его выращивания и могут меняться в довольно существенных пределах. В исследованиях кристаллов вольфрамата свинца, выполненных в последние 10 лет, можно выделить две стадии. Вплоть до конца 90-х гг. XX в. было опубликовано достаточно много экспериментальных данных с различными, часто противоречивыми интерпретациями, носившими явно спекулятивный характер. Однако в это же

время путем сопоставления экспериментальных данных были установлены: 1) технологические особенности выращивания кристалла, то есть преимущественная утечка ионов свинца из расплава, а следовательно, дефицит ионов свинца в кристалле, при его получении методом Чохральского; 2) метод одновременной компенсации катионных и анионных вакансий в кристалле посредством активации кристалла ионами со стабильным трехвалентным состоянием; 3) роль ионов Мо в формировании люминесцентных свойств кристаллов вольфрамата свинца и необходимая спецификация по примесным ионам в сырье для выращивания кристаллов; 4) особенности распределения электронной плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости. Это позволило непротиворечиво объяснить такие особенности кристалла, как его окраска, люминесцентные характеристики, изменение спектральных свойств под действием ионизирующего излучения.

Понимание физических процессов, происходящих в кристалле, позволило оптимизировать технологию кристалла и довести ее до уровня спецификации детекторов на LHC. Первой проблемой, которая была успешно решена, – это устранение желтого цвета кристаллов. Поглощение света сцинтилляций внутренними центрами в длинном кристалле создает большую неоднородность световых выходов вдоль сцинтилляционного элемента, что ухудшает энергетическое разрешение. Второй решенной проблемой стало устранение в кинетике сцинтилляций медленных компонент. Наконец третьей, наиболее важной из решенных проблем, явилось радикальное улучшение радиационной стойкости кристалла до уровня $1 \text{ м}^{-1}/100 \text{ крэд}$.

Разработанная в России массовая технология производства кристаллов вольфрамата свинца вкратце состоит в следующем. В базовой технологии исходным сырьем являются окислы PbO и WO_3 . Из этих порошков готовятся уплотненные таблетки, которые наплавляются в тигли, изготовленные на основе $\text{Pt-Al}_2\text{O}_3$. Перед выращиванием производится предварительная перекристаллизация на ростовых установках типа «Лазурит», с использованием платиновых тиглей размером $170 \times 0.9 \times 180$. В качестве затравки используется кристалл вольфрамата свинца, закрепляемый в платиновом охлаждаемом держателе. Выращивание кристаллов вольфрамата свинца проводится в ростовых установках типа «Кристалл 3М». В установках этого типа температурный градиент между расплавом и кристаллом создается путем отвода тепла от затравочного кристалла. Растущий кристалл вытягивается из расплава, получаемого высокочастотным нагревом в комбинированном платиновом тигле в заданной газовой среде. Установка автоматически поддерживает заданные скорости вытягивания, скорость вращения и температурный режим.

К технологическим параметрам, определяющим качество кристалла, относятся: 1) состав шихты; 2) состав газовой атмосферы; 3) ориентация затравки относительно кристаллографического направления роста; 4) температура выращивания; 5) скорость выращивания; 6) скорость вращения затравки; 7) скорость охлаждения. Опыты показали, что параметры 4–7 не очень критичны и могут меняться в относительно широких пределах без потери качества. Так, температура выращивания может лежать в пределах $1110\text{--}1150^\circ\text{C}$, скорость выращивания (вытягивания) – $(1\text{--}12) \text{ мм/час}$, скорость вращения затравочного кри-

сталла (1–50) об/мин., а скорость охлаждения – не более 150 С/час. Наиболее существенными оказались параметры 1–3. Кристалл выращивался в направлении кристаллографической оси «а». Этот параметр особенно сильно влиял на внутренние напряжения и проявлялся в виде сколов при операциях резки, шлифовки и т. п.

Монокристаллы, выращенные из смеси оксида вольфрама WO_3 и окиси свинца PbO , так же как и монокристаллы, выращенные из смеси оксида вольфрама WO_3 и окиси-заиси свинца Pb_3O_4 в воздушной атмосфере, имеют световыход $\sim 5\text{--}8$ фотоэлектронов/МэВ. Монокристаллы, выращенные из смеси оксида вольфрама WO_3 и окиси-заиси свинца Pb_3O_4 в атмосфере азота, или аргона с содержанием кислорода от $1 \cdot 10^{-3}$ до 1 об. %, имеют световыход существенно больше (выше 10 фотоэлектронов/МэВ). Они же имеют и лучшие характеристики пропускания на длине волны 440 нм (длина волны сцинтилляций).

Кристаллизационное оборудование допускает проведение нескольких последовательных кристаллизаций из одного тигля. Масса выращенного кристалла существенно меньше массы шихты, наплавленной в тигель. После добавления в тигель израсходованного количества материалов можно проводить выращивание следующего кристалла. Однако известно, что каждая последующая кристаллизация неизбежно должна изменять свойства кристалла. Понятно, что в массовом производстве экономически невыгодно использовать только одну кристаллизацию. Поэтому важной задачей явилось установление того, насколько сильно меняются свойства кристалла от цикла к циклу и если повторная кристаллизация возможна, то сколько таких циклов можно сделать без потери качества. Оказалось, что при использовании в качестве материалов для синтеза PbO и WO_3 , максимальное число кристаллизаций не превышает 6. В то же время использование оптимизированных составов шихты позволяет существенно увеличить число кристаллизаций. Технологический процесс становится более стабильным во времени и появляется возможность использования кристаллов, забракованных по механическим повреждениям, а также отходов резки для повторного использования.

Заключительным этапом в производстве кристаллов является их сертификация, которая производится на автоматизированном оборудовании, разработанном специалистами НИИ ЯП, LAPP (Франция) и ЦЕРНа.

В настоящее время БЗХТИ является основным производителем кристаллов вольфрамата свинца в мире. Каждый месяц производится не менее 1000 сертифицированных сцинтилляционных элементов для комплектования электромагнитного калориметра коллаборации CMS.

6. Заключение

Внедрение сцинтилляционных кристаллов вольфрамата свинца в физику высоких энергий обеспечило ей реальный прорыв в области прецизионной электромагнитной калориметрии. Достаточно дешевый и технологичный при выращивании и обработке кристалл, обладающий уникальными характеристиками (высокая плотность, малая радиационная длина, высокая прозрачность, хорошая радиационная стойкость и высокая скорость высвечивания сцинтилляций), занял

лидирующие позиции в электромагнитной калориметрии. Наличие в России больших мощностей для его производства позволяет верить в реальность создания крупнейших электромагнитных калориметров нового поколения. Общая мировая потребность сегодня составляет порядка 100 тыс. кристаллов PWO до 2010 г., основное количество которых было или будет изготовлено в России. Сегодня уже изготовлено более 60 тыс. элементов для CMS и около 10 тыс. для ALICE. Внедрение вольфрамата свинца в экспериментальную физику по праву считается выдающимся достижением последнего десятилетия.

LEAD TUNGSTATE SCINTILLATION CRYSTALS FOR PRECISE ELECTROMAGNETIC CALORIMETRY ON HIGH LUMINOSITY ACCELERATORS

M. V. Korzhik, V. A. Kachanov*, A. N. Annenkov,
O. V. Missevitch, A. A. Fedorov**

In the last two decades a new type of the scintillation material namely lead tungstate crystal (PbWO_4 , PWO) has been developed. The PWO crystal is a high density, fast and radiation hardness scintillation material. The crystal allows to create new generation of the compact and fast electromagnetic calorimeter with 4π geometry like as CMS Collaboration (100 000 detector units) and PANDA Project (20 000 detector units) to detect γ -quanta and electrons (positrons) in wide energy range, 10 MeV – 1 GeV.

* Institute of High Energy Physics, Protvino.

** Steel and Alloy Technical University. Moscow, Russia.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ КАЛОРИМЕТР НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОВ ВОЛЬФРАМАТА СВИНЦА ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА PANDA (GSI, ГЕРМАНИЯ)

В. И. Дорменев, Г. Ю. Дробышев, М. В. Коржик, О. В. Мисевич

1. Введение

Проведение современных экспериментов по физике высоких энергий требует создания нового типа ускорительных комплексов. При этом увеличение интенсивности пучка и энергии ускоряемых частиц требует разработки нового поколения детекторных установок, которые должны обеспечивать высокую скорость счета, регистрируемых событий, широкий диапазон энергии регистрации вторичных частиц и быть радиационно-стойкими к ионизирующему излучению. Важной составной частью современных детекторных установок является электромагнитный калориметр (ЭМК) на основе неорганических сцинтилляционных кристаллов.

Одним из широко применяемых сцинтилляционных материалов в экспериментальной физике частиц является кристалл вольфрамата свинца, PbWO_4 (PWO) [1]. Данный материал был выбран в качестве сцинтиллятора для электромагнитного калориметра при разработке таких экспериментальных установок, как PRIMEX в JLAB [2], CMS-ECAL и ALICE-PHOS на ускорителе LHC (ЦЕРН) [3] и PANDA на ускорителе FAIR (GSI, Германия).

В данной работе представлены результаты исследований по оптимизации свойств кристаллов вольфрамата свинца для применения в ЭМК эксперимента PANDA.

2. Эксперимент PANDA

Эксперимент PANDA будет проводиться на базе высокоэнергетического накопительного кольца HESR (High Energy Storage Ring). С помощью ускорителя HESR будет возможно формирование пучка антипротонов интенсивностью вплоть до 10^{11} с^{-1} и с энергией в диапазоне 1.5–15 ГэВ [4, 5].

Экспериментальная программа проекта PANDA охватывает следующие направления [6, 7]:

1. Спектроскопия чармония ($c\bar{c}$): измерение энергии и ширины уровня всех состояний чармония с высокой точностью. Следует отметить, что важным преимуществом экспериментов с реакциями pp , в отличие от e^-e^+ реакций, является возможность получения мезонов со всеми разрешенными квантово-механическими состояниями по спину заряду и четности. Примерами реакций, которые необходимо будет регистрировать в этом случае, являются $pp \rightarrow \eta_c \rightarrow \gamma\gamma$, $pp \rightarrow J/\psi \rightarrow e^+e^-$.

2. Исследование свойств экзотических адронов (гибриды, глюболы, содержащие c - и $\bar{c}$ -кварки) в области масс чармония (3–5 ГэВ), предсказанных в рамках квантовой хромодинамики. Примеры реакций: $pp \rightarrow h_c \eta \rightarrow \chi_c \pi^0 \pi^0 \eta$, $pp \rightarrow DD \rightarrow KK\pi KK\pi$.

3. Исследование структуры одиночных и двойных гиперядер, гиперон-нуклонного и гиперон-гиперон взаимодействия с помощью точной γ -спектроскопии в реакциях типа $pp \rightarrow \Lambda\Lambda$ и $pp \rightarrow \Xi\Xi$.

Регистрация многих реакций будет проводиться по электромагнитному каналу распада, с регистрацией γ -квантов, электронов и позитронов. При этом энергия регистрируемых частиц будет находиться в диапазоне от 10 МэВ до 10 ГэВ. Оптимальным решением данной задачи является применение гомогенного ЭМК на основе кристаллов PWO.

3. Увеличение выхода сцинтилляции кристаллов вольфрамата свинца

В последние 15 лет в НИИ ЯП БГУ был разработан сцинтилляционный кристалл вольфрамата свинца, который выбран в качестве рабочего материала для ЭМК эксперимента CMS.

Кристаллы PWO, оптимизированные для применения в ЭМК эксперимента CMS, имеют быструю кинетику сцинтилляций, высокие плотность и радиационную стойкость. Для обеспечения высокой радиационной стойкости кристаллы данного типа активируются ионами La и Y на уровне 100 ppm.

Главным недостатком этих кристаллов с точки зрения применения в ЭМК эксперимента PANDA является относительно низкий выход сцинтилляции (8–12 фэ/МэВ при использовании ФЭУ XP 2020Q), что очень критично для энергетического разрешения ЭМК при регистрации γ -квантов низких энергий, вплоть до нескольких десятков МэВ.

Авторами [8, 9] было выдвинуто предположение, что дальнейшее увеличение световых выхода сцинтилляции PWO возможно получить двумя методами. Во-первых, уменьшением концентрации точечных дефектов в структуре кристаллов, во-вторых, активацией кристалла люминесцентными примесными центрами, которые имеют большое сечение электронного захвата из зоны проводимости и относительно короткое время последующей излучательной рекомбинации. В результате дальнейших исследований по оптимизации свойств кристаллов PWO были получены образцы с повышенным световыходом – так называемый кристалл PWO-II. Кристалл PWO-II длиной 20 см имеет световыход 17–22 фэ/МэВ при проведении измерений на ФЭУ XP 2020Q при комнатной температуре. Уровень активации кристаллов PWO-II ионами La и Y равен 40 ppm.

Таким образом, было получено двукратное увеличение световыхода для полноразмерных образцов кристаллов PWO-II по сравнению с образцами для проекта CMS. Это достигнуто путем повышения структурного совершенства кристаллов и уменьшения концентрации используемых активаторов. При этом радиационно-наведенное оптическое поглощение и кинетика высвечивания сцинтилляции сохранились на ранее достигнутом уровне.

4. Температурная зависимость световыхода кристаллов PWO-II

В дополнение к увеличению выхода сцинтилляций за счет совершенствования технологии, дальнейшее увеличение выхода достигается при охлаждении кристалла. Это объясняется тем, что при охлаждении кристалла температурное тушение сцинтилляции становится менее интенсивным, что приводит к увеличению

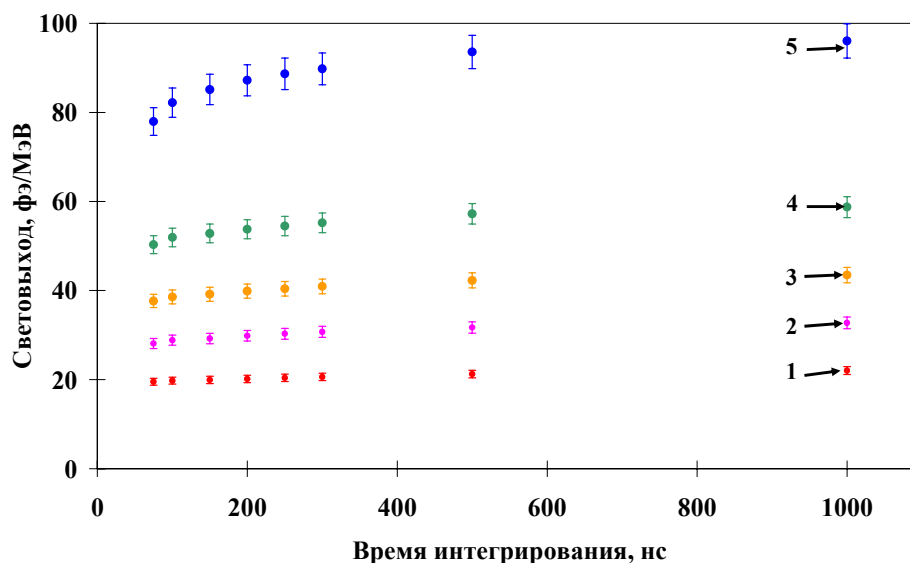


Рис. 1. Зависимости среднего значения световыхода от времени интегрирования для 10 кристаллов PWO-II при различных температурах: 1 – измерение при $T = +25\text{ }^{\circ}\text{C}$; 2 – измерение при $T = +10\text{ }^{\circ}\text{C}$; 3 – измерение при $T = 0\text{ }^{\circ}\text{C}$; 4 – измерение при $T = -10\text{ }^{\circ}\text{C}$; 5 – измерение при $T = -25\text{ }^{\circ}\text{C}$

световыхода. Однако в неактивированных кристаллах понижение температуры приводит к существенному замедлению кинетики люминесценции, а следовательно, и сцинтилляции, за счет возрастания интенсивности медленных компонент [10].

Установлено, что в активированных кристаллах, выращенных по оптимизированной технологии, при понижении температуры не происходит столь быстрого перераспределения кинетики сцинтилляций в сторону медленных компонент. На рис. 1 представлены результаты измерения световыхода кристалла PWO-II при различных температурах и временах интегрирования. Видно, что величина световыхода при понижении температуры с $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+25\text{ }^{\circ}\text{C}$ возрастает в среднем в 4 раза при значении времени интегрирования 75 нс и в 4.5 раза – при 1000 нс. Это объясняется тем, что при охлаждении образца температурное тушение сцинтилляции становится менее интенсивным, это приводит к увеличению световыхода за счет возрастания интенсивности медленных компонент в сцинтилляции. Из приведенных зависимостей можно сделать вывод, что при температуре $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ не менее 90 % запасенной светосуммы высвечивается в среднем за 200 нс.

5. Свойства матрицы 3×3 кристаллов 3×3 PWO-II с ЛФД в качестве фотодетектора при облучении на пучках γ -квантов

Важным этапом при создании ЭМК является проведение тестовых исследований матриц, состоящих из нескольких детекторных модулей, на пучках частиц с целью оценки основных характеристик калориметра. Результаты таких измерений позволяют однозначно оценить разрешающую способность всего детек-

тора с привлечением численного моделирования и параметров, полученных экспериментальным путем.

В данном разделе представлены результаты тестовых исследований матрицы 3×3 кристаллов PWO-II ($2 \times 2 \times 20$ см) с ЛФД (активная площадь 1 см^2) в качестве фотодетектора на пучках γ -квантов. Экспериментальная установка была собрана на базе *Tagged Photon Facility* в научно-исследовательском центре МАМІ (Майнц, Германия). Пучок вторичных γ -квантов формировался в результате коллимации фотонов тормозного излучения, образовавшихся в результате прохождения первичного пучка электронов с энергией 855 МэВ через никелевый радиатор. Энергия γ -кванта определялась по разнице энергий электрона первичного пучка до вхождения в радиатор и этого же электрона регистрируемого после прохождения его через радиатор. Траектория пучка электронов задавалась конфигурацией магнитного поля, создаваемого дипольным магнитом. Диапазон энергии γ -квантов составлял 40–675 МэВ. Температура матрицы составляла 0°C .

На рисунке 2 представлена экспериментальная зависимость энергетического разрешения матрицы 3×3 кристаллов вольфрамата свинца от энергии γ -квантов и результат ее фитирования выражением вида

$$\frac{\sigma}{E} = \frac{1.98\%}{\sqrt{E}} \oplus 1.68\% .$$

Полученное значение статистического члена энергетического разрешения, равное 1.98 %, удовлетворяет требованиям экспериментальной программы проекта PANDA. При этом следует ожидать дальнейшего уменьшения статистического члена энергетического разрешения при понижении рабочей температуры матрицы до -25°C .

6. Заключение

Улучшение структурного совершенства синтетических кристаллов вольфрамата свинца позволяет снизить концентрацию активаторов иттрия и лантана, используемых для повышения радиационной стойкости кристаллов, до суммарной концентрации 40 ppm. Тем самым достигается двукратное увеличение выхода сцинтилляций в кристалле при $+25^\circ\text{C}$, до 19 ± 2 фэ/МэВ, для элементов длиной более 20 см, при сохранении их радиационной стойкости и быстродействия сцинтилляций.

Понижение температуры эксплуатации данного кристалла до -25°C позволяет увеличить световыход дополнительно не менее чем в четыре раза, при этом 90 % света сцинтилляций высвечивается за время не более 200 нс. Таким образом, суммарное увеличение световыхода кристаллов PWO-II при температуре -25°C составляет 8–9 раз в сравнении с кристаллами для ЭМК эксперимента CMS, которые будут эксплуатироваться при комнатной температуре.

Полученное значение статистического члена энергетического разрешения для матрицы 3×3 кристаллов PWO-II с ЛФД при температуре 0°C удовлетворяет требованиям к ЭМК эксперимента PANDA. Это позволит применять кристалл PWO-II в детекторах, работающих в диапазоне низких и средних энергий γ -квантов и электронов, начиная с 10 МэВ, на ускорителях с большой светимостью.

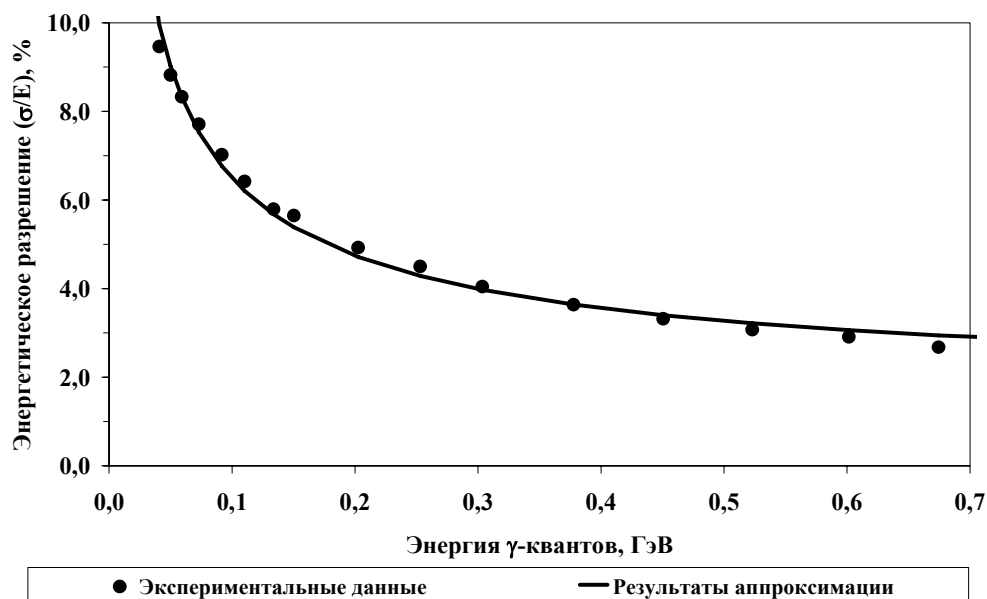


Рис. 2. Энергетическое разрешение матрицы 3×3 кристаллов вольфрамата свинца с ЛФД в качестве фотодетекторов. Температура 0 °С

Литература

1. *Annenkov A. N., Korzhik M.V., Lecoq P.* // NIM 2002. Vol. A490, №1/2. P. 30.
2. *Kubantsev M. et al.* // e-Print ArXive physics, 0609201; JLAB-PHY-06-528. 2006.
3. *Price M.J.* // NIM. 2002. Vol. A478, № 1/2. P. 46.
4. *Franzke B. et al.* // NIM. 2004. Vol. A532, № 1/2. P. 97.
5. *Lehrach A. et al.* // NIM. 2006. Vol. A561, № 1. P. 289.
6. *Peters K.* // NIM. 2004. Vol. B214. P. 60.
7. *Schmitt L. et al.* // NIM. 2007. Vol. A581, № 1/2. P.542.
8. *Борусевич А.Е. и др.* // Приборы и техника эксперимента. 2006. № 2. С. 59.
9. *Fedorov A. et al.* // SCINT2005: Proc. 8th Intern. Conf. on inorganic scintillators and their use in scientific and industrial applications. 2006. P. 389.
10. *Nikl M. et al.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1996. Vol.195, № 1. P. 311.

ELECTROMAGNETIC CALORIMETER BASED ON THE LEAD TUNGSTATE CRYSTALS FOR THE PANDA EXPERIMENT (GSI, GERMANY)

V. I. Dormenev, G. Yu. Drobychev, M. V. Korzhik, O. V. Missevitch

New accelerator FAIR (Facility for Antiproton and Ions Researches) will be created at the nearest future at GSI (Darmstadt, Germany). The PANDA detector will be installed at the FAIR for the hadron physics studies using a cooled antiproton beams. PWO-II a new type of the lead tungstate crystal was chosen as a scintillation material for the electromagnetic calorimeter construction of the PANDA detector. Some research results of the PWO-II crystal light yield improvement and beam test of the 3×3 crystals matrix in the temperature range from –25 °C till +25 °C are presented at the paper.

ИСТОЧНИК ПОЗИТРОНИЕВ НА ОСНОВЕ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ИЗМЕРЕНИЮ МАССЫ АНТИВОДОРОДА

Г. Ю. Дробышев, А. Е. Борисевич, О. Л. Войтик*, К. И. Делендик*

1. Введение

В настоящее время в Европейской лаборатории физики частиц (ЦЕРН) формируется международная научная коллаборация AEGIS [1], целями которой являются проведение экспериментов по исследованию поведения антиводорода в гравитационном поле и обнаружение нарушения СРТ четности антиводорода [2]. Планируется, что будут получены экспериментальные результаты в области фундаментальных исследований «за пределами» стандартной модели (поиск дополнительных размерностей и «зеркальной» темной материи) и развиты теоретические представления физики частиц высоких энергий.

Научная идея коллаборации AEGIS состоит в использовании взаимодействия пучка холодных антипротонов с позитрониями (Ps), возбужденными в Ридберговское состояние. Возбуждение позитрониев служит двум целям: увеличивается время жизни позитрониев и уменьшается энергия связи позитрона с электроном. Таким образом, для осуществления экспериментов, необходимо решить проблему формирования облака позитрониев. Это облако: 1) должно быть максимально холодным, чтобы увеличить сечение взаимодействия; 2) находиться достаточно далеко от материала, в котором позитронии сформировались, чтобы стало возможным их возбуждение лазером в Ридберговское состояние.

Позитронии будут формироваться в результате взаимодействия пучка медленных позитронов с соответствующей мишенью. Данное явление известно давно [3], однако эффективность образования позитрониев как функция параметров, таких как: материал, энергия начальных позитронов и угловое распределение изучены слабо. Таким образом, разработка источника позитрониев с необходимыми характеристиками является одной из ключевых задач при создании экспериментальной установки коллаборации AEGIS.

2. Анодный оксид алюминия – перспективный материал для формирования облака позитрониев

В качестве материала мишени нами было предложено использовать анодный оксид алюминия (АОА). АОА формируется электрохимическим окислением алюминия в электролитах, умеренно растворяющих АОА, и представляет собой регулярное гексагональное построение одинаковых ячеек, которые параллельны друг другу и нормальны к поверхности алюминиевой основы. Каждая индивидуальная ячейка имеет осевую пору, закрытую со стороны алюминиевого анода барьерным слоем оксида. На рис. 1, а схематически показана ячеистопористая структура анодного оксида алюминия, а на рис. 2 – фотографии, сделанные с помощью электронного микроскопа. Благодаря наличию в мишени из АОА регулярных каналов с хорошо контролируемыми размерами, мы надеемся

* Институт физики НАН Беларуси, Минск.

достичь большего выхода позитрониев по сравнению с широко используемыми мишенями из оксида кремния, полости которых имеют различные размеры и могут не иметь выхода на поверхность (рис. 1, б [4]).

В ходе совместных исследований с нашими партнерами из Лаборатории физики частиц (Анси-ле-Вье, Франция), было экспериментально подтверждено, что образовавшиеся в материале мишени позитронии выходят по имеющим регулярную структуру каналам из объема мишени наружу и доля образовавшихся и вышедших из мишени ортопозитрониев составляет порядка 20 %, что делает предложенный материал пригодным для использования в качестве источника позитрониев [5].

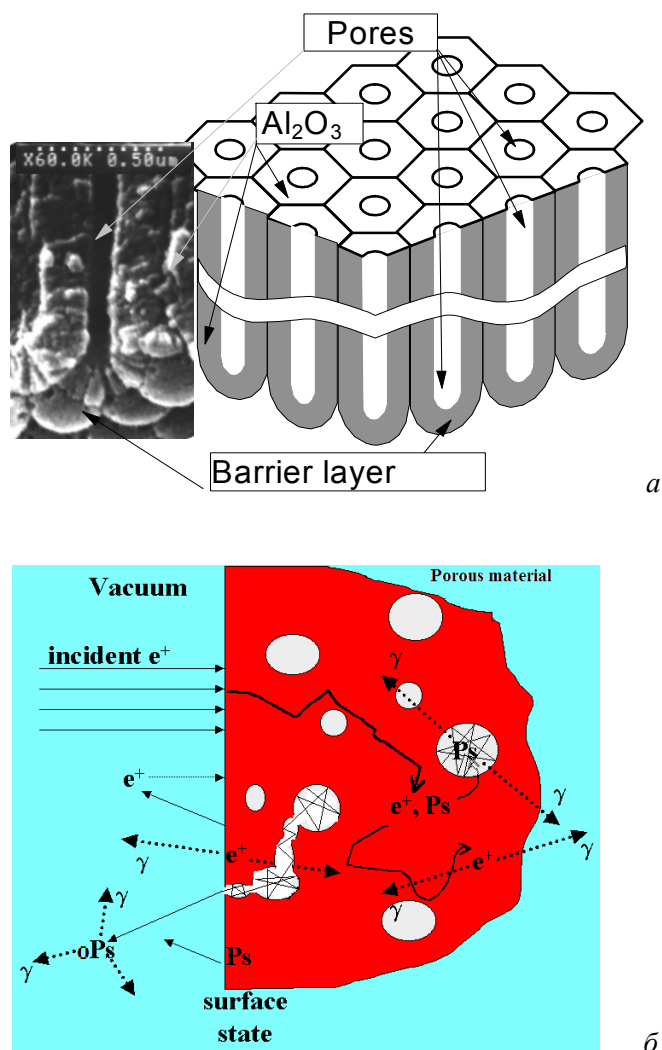


Рис. 1. Схематическое представление анодного оксида алюминия (а); возникновение и поведение позитрониев в пористой мишени (б)

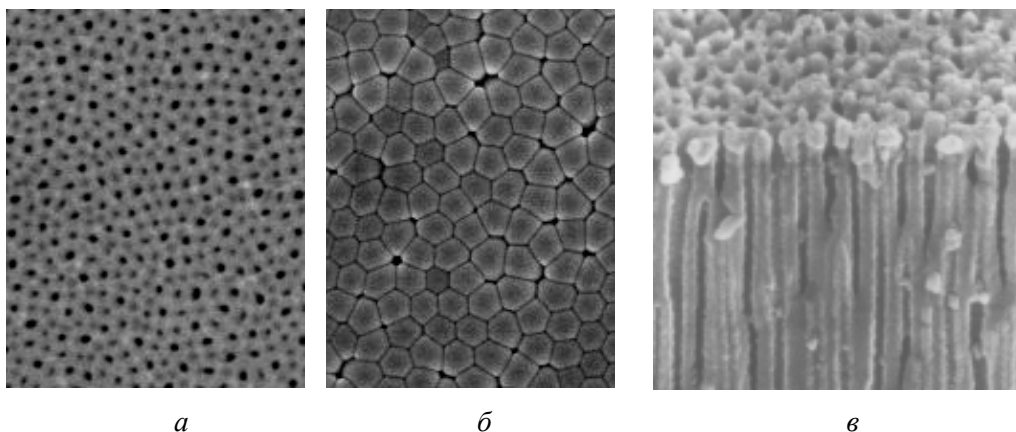


Рис. 2. Электронно-микроскопические снимки АОА: *а* – со стороны пористого слоя; *б* – скол; *в* – со стороны барьерного слоя

3. Исследования физических характеристик мишеней, легированных ионами металлов

Необходимость легирования обусловлена тем, что получаемый в результате стандартного технологического процесса анодный оксид алюминия является диэлектриком. Его электрическое сопротивление составляет единицы ГОм. Однако мишень должна не только обеспечивать высокий выход позитрониев, но и удовлетворять ряду технических требований, обусловленных условиями проведения эксперимента. В частности, применение непроводящей мишени является крайне нежелательным, т. к. создает существенные дополнительные трудности для оптимизации электрических полей в зоне эксперимента. Поэтому нами были проведены исследования возможности повышения электрической проводимости материала мишеней.

Основную технологическую проблему легирования составляла необходимость внедрить значительное количество ионов металла, которое обеспечивало бы достаточно высокую проводимость образцов, однако при этом не должна нарушаться присущая чистому анодному оксиду алюминия структура каналов. Использование метода ионной имплантации было признано нецелесообразным, так как данный метод не обеспечивает вхождения макроскопически значимого количества ионов в объем образца. В результате предварительных оценок перспективными для дальнейшей разработки были признаны три метода: выращивание образцов АОА из сплавов алюминия и другого металла и использование в процессе выращивания генератора переменного напряжения специальной формы и напыление проводящего покрытия на поверхность и стенки каналов мишени.

Для проверки работоспособности первого метода были проведены серии экспериментов по анодированию различных типов сплавов алюминия с другими металлами, такими как магний и марганец. В результате проведенных экспериментальных исследований было установлено, что сопротивление образцов практически не отличается от сопротивления чистого оксида алюминия.

Полученные образцы были подвергнуты спектральному анализу. Из спектрограммы (рис. 3) следует, что, кроме алюминия, металлы, входящие в состав сплава, не входят в состав оксида, как это предполагалось ранее. По-видимому, при электрохимическом окислении сплава происходит стравливание данных металлов и их переход в раствор в виде ионов с последующим разрядом на катоде.

Идея инкорпорирования ионов металлов в АОА в процессе электрохимического окисления алюминия состоит в следующем:

- в раствор электролита вводятся металлосодержащие агенты: соли, металлические кислоты, металлоорганические комплексы;
- анодирование производится с использованием переменного напряжения специальной формы;
- в анодный полупериод происходит рост анодного оксида алюминия, в катодный – разряд ионов металлов у дна пор АОА.

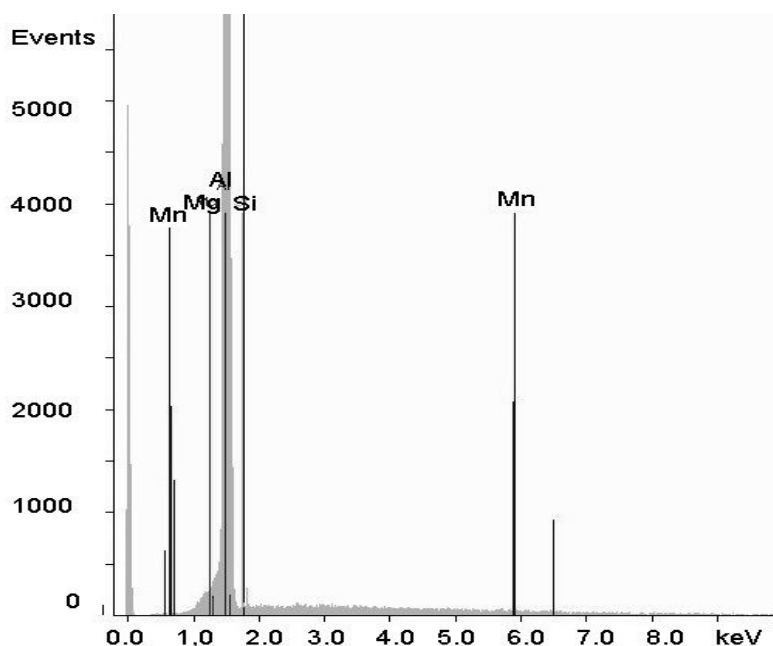


Рис. 3. Спектрограмма образца, выращенного из сплава

Предполагается, что происходит осаждение металла на барьерном слое АОА на дне пор с последующим его включением в состав АОА. Количество металла, осаждаемого в катодном полупериоде, контролируется по токовым характеристикам процесса.

Были предприняты попытки получения АОА, содержащего следующие металлы: цинк, олово, никель, магний, алюминий, медь, вольфрам, тантал, молибден, свинец. В настоящее время достигнут успех в инкорпорировании свинца (рис. 4) и молибдена. Разработанная процедура позволяет контролировать количество осажденного металла. Как показали проведенные исследования, распределение металла по объему оксида – равномерное.

Измерения показали, что сопротивление полученных этим методом образцов также мало отличается от сопротивления чистого АОА. Для того чтобы инкорпорированные металлы оказали влияние на общую проводимость АОА, необходимо осуществить их активацию, т. е. провести частичное восстановление окислов металлов. Для этого планируется использовать отжиг в среде водорода или в вакууме. В настоящее время продолжаются исследования по оптимизации параметров термической обработки пластин в вакууме или в водороде с целью восстановления легирующих металлов в приповерхностных областях стенок каналов мишеней.

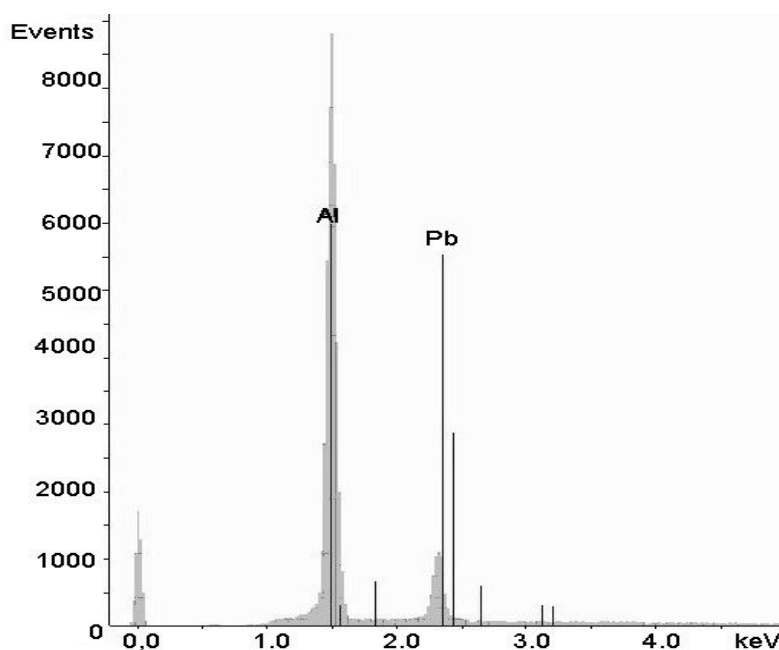


Рис. 4. Спектрограмма образца, легированного ионами свинца

Наилучшие результаты были получены при нанесении проводящих металлооксидных покрытий на стенки каналов мишени различными методами, в частности, напылением металлов в вакууме с последующим окислением и нанесением покрытий из растворов металлоорганических соединений с последующим отжигом. В качестве материалов оксидных покрытий использовались оксиды никеля и магния.

В настоящее время положительные результаты достигнуты при использовании оксидного никелевого покрытия, полученного напылением пленок никеля различной толщины на стенки каналов мишени с последующим их окислением.

Нами были проведены исследования электрического сопротивления в вакууме образцов с проводящими покрытиями. Установлено, что электрическое сопротивление, в зависимости от условий получения проводящей пленки, составляет от 1 МОм до нескольких сотен МОм при комнатной температуре.

4. Разработка технологии формирования мишени с заданным диаметром каналов

Естественная пористость АОА составляет от 10 до 200 нм. Образцы, на которых нами был получен максимальный выход позитрониев, имели каналы диаметром порядка 100 нм. Однако мы полагаем, что при таких размерах каналов, значительная часть сформировавшихся в материале позитрониев испытывает большое количество соударений и аннигилирует, не успев выйти из мишени. Поэтому нами начаты исследования, с целью нахождения оптимальных размеров каналов в диапазоне до нескольких мкм. Для формирования каналов требуемого диаметра в пластинах АОА был использован метод травлением через фоторезистивную маску.

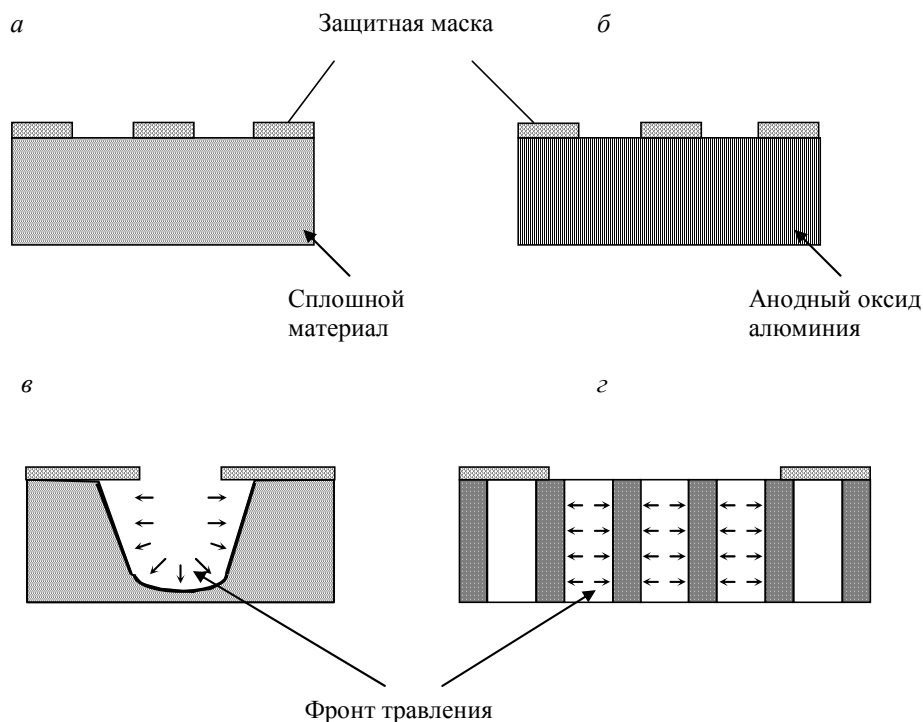


Рис. 5. Процесс травления сплошного (*a*, *в*) и пористого (*б*, *г*) материалов

Процессы химического травления структурированных материалов, в частности АОА, имеющего регулярную пористую структуру, и сплошных однородных материалов значительно отличаются друг от друга. Рассмотрим особенности поведения сплошного материала, например металла, и АОА при изготовлении из них химическим травлением какой-либо микроструктуры, например, матрицы сквозных каналов. На рис. 5, *a*, *б* изображены соответствующие схемы. В случае сплошного материала фронт травления распространяется более или менее одинаково по всем направлениям вследствие изотропности процесса, а

при наличии защитной маски на поверхности имеет место подтравливание материала под край маски и неоднородность сечения канала по его глубине (рис. 5, в). В случае АОА, травитель, проникая вглубь каналов на всю длину, разрушает их стенки, т. е. фронт травления движется параллельно поверхности алюминиевой основы. Таким образом, наблюдается своего рода анизотропия процесса травления, обусловленная наличием упорядоченной ячеисто-пористой структуры АОА. При этом образуются вертикальные каналы с минимальным уходом по размеру (рис. 5, г).

Для экспериментальных целей был разработан и изготовлен фотошаблон, представляющий собой позитивное изображение мишени с каналами диаметром 5 мкм и межканальным расстоянием 5 мкм. Была разработана процедура изготовления пластин АОА с травленными каналами.

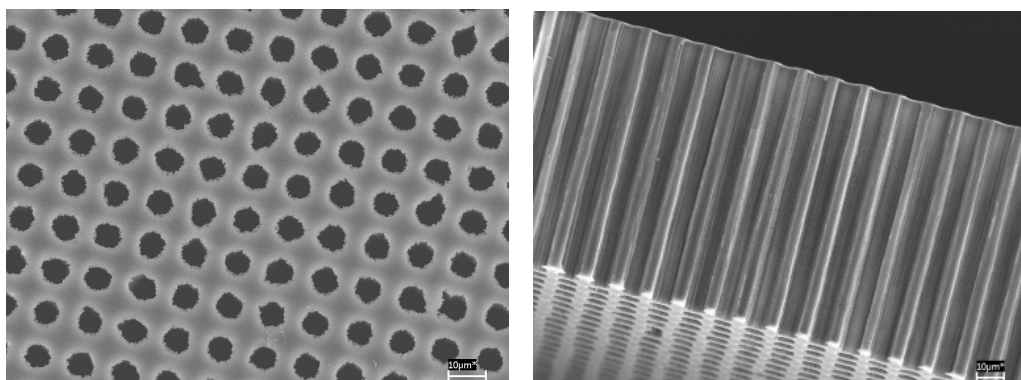


Рис. 6. Электронно-микроскопические снимки мишеней на основе АОА

Технология изготовления мишеней такого рода оказалась крайне сложной и потребовала значительных усилий для реализации. В частности, высокий коэффициент заполнения мишени обуславливал разрушение маски, нарушение целостности структуры пластины АОА при травлении.

К настоящему времени нами получены соответствующие структуры из АОА со следующими параметрами:

- диаметр – 24 мм;
- диаметр рабочей поверхности – 20 мм;
- толщина – 100–120 мкм;
- диаметр каналов – 5–6 мкм;
- межканальное расстояние – 4–5 мкм;
- калибр (отношение толщины к диаметру каналов) – от 20 и более;
- количество каналов – $1 \cdot 10^6$ на 1 см^2 .

На рисунке 6 показаны полученные структуры. Видно, что каналы протравлены насквозь, расположены регулярно, и имеют одинаковый диаметр по всей толщине пластины.

5. Заключение

Экспериментально продемонстрировано, что образовавшиеся в материале мишени позитронии будут выходить по имеющим регулярную структуру каналам из объема мишени наружу и доля образовавшихся и вышедших из мишени ортопозитрониев составляет порядка 20 %, что делает материал пригодным в качестве источника облака позитрониев. Исследованы возможности увеличения электрической проводимости образцов за счет легирования ионами металлов различными методами. Разработана технология травления пластин АОО с целью получения каналов оптимального диаметра. В настоящее время ведется работа по оптимизации разработанной технологии и доведению толщины мишени до 150–180 мкм с сохранением параметров микроканальной структуры.

6. Благодарности

Авторы выражают благодарность партнерам из НЦНИ (Франция): Д. М. Сью, П. Неделеку, К. Ба, Н. Шарвану за помощь в проведении экспериментальных исследований процессов формирования позитрония в различных материалах, а также П. Ф. Сафронову (НИИ ЯП) за помощь при проведении экспериментальных исследований.

Г. Ю. Дробышев и А. Е. Борисевич признательны Национальному центру научных исследований Франции и Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований за поддержку данной работы, оказываемую в рамках международного гранта БРФФИ Ф07Ф-004.

Литература

1. *Kellerbaue A., ... , Drobychev G. et al. // NIM. 2008. Vol. B266. P. 351.*
2. *Walz J., Hänsch T.W. // General Relativity and Gravitation. 2004. Vol. 36. P. 561.*
3. *Paulin R., Ambrosino G. // J. Phys. 968. Vol. 29. P. 263.*
4. *Charlton M. // Hyperfine Interactions. 1997. Vol. 109. P. 269.*
5. *Djourelou N., Palacio C. A. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. Vol. 20. P. 095206.*

POSITRONIUM SOURCE ON A BASIS OF ANODIC ALUMINUM OXIDE FOR THE EXPERIMENT ON A ANTI-HYDROGEN MASS MEASUREMENTS

G. Yu. Drobychev, A. E. Borisevich, O. L. Voitik*, K. I. Delendik*

It was experimentally shown that positroniums which are formed in the anodic aluminum oxide (AAO) will exit from target through regular channels. A part of OPs that leave target reaches 20 % which makes material to be usable as a source of positroniums cloud. Possibilities to increase an electric conductivity of samples were studied. A technology of AAO plates etching is developed in order to optimize channels diameter.

* Institute of Physics, Minsk, Belarus.

ПРИМЕНЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ PWO В КОМПЕНСИРОВАННЫХ ГИБРИДНЫХ КАЛОРИМЕТРАХ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Г. Ю. Дробышев, А. Е. Борисевич, В. И. Дорменев, М. В. Коржик,
А. Е. Корнеев, В. А. Мечинский

1. Введение

Развитие физики высоких энергий в последние десятилетия привело к возникновению насущной необходимости в создании технической базы, которая позволила бы вести исследования в области энергий частиц порядка нескольких ТэВ. С одной стороны, в ходе этих экспериментов планируется продолжить исследования в рамках так называемой «Стандартной модели» (СМ) [1]. СМ включает в рассмотрение такие понятия, как частицы материи, силы и механизм П. Хиггса [2, 3], объясняющий возникновение фундаментальных частиц, лептонов, кварков и калибровочных бозонов посредством взаимодействия со скалярным полем, распространенным в пространстве – времени. С другой стороны, новые эксперименты должны создать основу для разработки более общей модели, включающей СМ как частный случай [4, 5]. В ходе экспериментов, проведенных на ускорителе LEP2 в Европейской лаборатории ядерных исследований (ЦЕРН), был установлен нижний предел массы бозонов Хиггса – 100 ГэВ, однако достоверных результатов, свидетельствующих о существовании или не существовании бозонов Хиггса не было получено в силу ограниченности возможностей LEP2.

Для обеспечения потребностей физики высоких энергий ближайшего десятилетия в Европейской лаборатории физики частиц (ЦЕРН) создан Большой адронный коллайдер (Large Hadron Collider, LHC). Он позволит организовать ряд крупных многоплановых экспериментов при энергиях до 14 ТэВ при интенсивности пучка $10^{34} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ [6, 7]. На базе этого ускорителя планируется проведение нескольких экспериментов, являющихся ключевыми для дальнейшего развития фундаментальных исследований в области физики частиц высоких энергий, таких как, например, эксперимент CMS по поиску бозонов Хиггса [8]. Каждый подобный эксперимент включает многоуровневую детектирующую систему, одним из принципиальных элементов которой являются системы электромагнитного (ЭМК) и адронного калориметров (АК).

Поскольку специфика современных исследований в данной области заключается в значительном, порядка 20 лет, времени, требуемом на разработку, постройку и организацию экспериментальных исследований такого рода, уже сейчас начаты исследования по разработке подходов и принципов построения новых экспериментов «после LHC». В частности, начата проработка принципов работы и конструкций адронных калориметров, которые будут использоваться в экспериментах на планирующемся Международном линейном электронно-позитронном коллайдере ILC [9], Компактном линейном коллайдере CLIC [10] и других новых ускорителях.

Одной из принципиальных особенностей современных экспериментов по физике высоких энергий является чрезвычайно высокие требования к энергетическому разрешению калориметров в совокупности с необходимостью их функционирования в интенсивных радиационных и электромагнитных полях. Данные требования обусловлены необходимостью регистрации чрезвычайно редких событий, что уже привело к увеличению светимости в новом поколении экспериментальных установок. В настоящее время ведутся работы по созданию прототипов электромагнитных и адронных калориметров.

При обсуждении концепций построения новых калориметров для физики высоких энергий в настоящее время выявились следующие принципиальные тенденции:

- предлагается разрабатывать гибридные калориметры для регистрации и электромагнитной и адронной компонент, что позволит избежать негативного влияния материала ЭМК на работу АК и повысить точность идентификации частиц;
- предлагается, что конструкция АК должна обеспечить их компенсацию (т. е. эквивалентность сигналов от электромагнитной и неэлектромагнитной компонент) [11].

Исследование принципов построения новых адронных калориметров проводится в настоящее время на экспериментальном детекторе DREAM (Dual-REAdout Module – модуль с двойным трактом регистрации) [12– 17]. Принципиальной особенностью детектора DREAM является одновременная регистрация сцинтилляционного и черенковского сигнала в каждом детектирующем элементе калориметра. Детектирующий элемент состоит из семи оптических световодов, материал в трех из которых активирован, т. е. является сцинтиллятором, а остальные четыре регистрируют только черенковское излучение. Одновременная регистрация сцинтилляционного и черенковского излучений должна обеспечить надежную сепарацию релятивистских и нерелятивистских частиц ливня и уменьшить флуктуации электромагнитной компоненты ливня. В результате уменьшаются вызванные этими флуктуациями эффекты, такие как нелинейность сигнала и негауссовость функции отклика, что, в свою очередь, улучшает адронное энергетическое разрешение.

2. Кристалл PWO – перспективный материал для нового поколения калориметров

Нами было предложено использовать при разработке нового гибридного калориметра сцинтилляционные кристаллы вольфрамата свинца PbWO_4 (PWO), в которых будет осуществлена одновременная регистрация как сцинтилляционных, так и черенковских фотонов, возникающих под действием электромагнитной (ЭМ) и адронной (А) компонент.

Сцинтиллятор PWO был разработан научной группой НИИ ЯП в сотрудничестве с Европейской лабораторией физики частиц – ЦЕРН (Женева, Швейцария), Лабораторией физики частиц – ЛАПП (Анси-ле-Вье, Франция) и Богородицким заводом теххимических изделий – БЗТХИ (Богородицк, Россия) для

применения в новом поколении экспериментов в области физики высоких энергий, планируемых на ускорителях с высокой светимостью. По сравнению с другими используемыми сцинтилляторами, кристалл PWO имеет самую высокую плотность, наименьшие радиационную длину L_R и радиус Мольера R_M , что позволило создать на основе PWO компактные ЭМК с высокой эффективностью регистрации гамма-квантов высоких энергий.

Благодаря уникальному сочетанию своих характеристик вольфрамат свинца уже стал наиболее широко применяемым сцинтилляционным материалом в экспериментах по физике частиц текущего десятилетия [18]. В настоящее время кристалл PWO используется для изготовления Электромагнитного калориметра (ECAL) проекта CMS и Фотонного детектора в эксперименте ALICE в CERN [8, 19], а также для создания детектора для коллаборации PANDA в GSI (Дармштадт, Германия).

Большой коэффициент преломления PWO ($n = 2.28$) делает его пригодным для использования в качестве черенковского радиатора. Применение современных технологий позволяет выращивать сцинтилляционные элементы PWO длиной до 30 см. Эта длина соответствует порядка 1.5 ядерных длин взаимодействия, что гарантирует возникновение адронного ливня в кристалле. Одновременная регистрация сцинтилляционного и черенковского света из кристалла должна обеспечить надежное разделение релятивистских и нерелятивистских частиц в ливне и снизить влияние флуктуаций электромагнитной компоненты на энергетическое разрешение. Это, в свою очередь, позволит уменьшить нелинейность сигнала и негауссовость функции отклика, которые возникают вследствие флуктуаций электромагнитной компоненты. Таким образом, будет улучшено энергетическое разрешение детектора при регистрации адронов.

Проблема компенсации гибридного ЭМ-А калориметра, в конструкции которого используются сцинтилляционные кристаллы, может быть решена с помощью традиционного метода селективного усиления адронного сигнала за счет ядерных взаимодействий, при этом высокая концентрация свинца в PWO является положительным фактором [11]. Также могут оказаться эффективными два метода компенсации «off-line».

Первый метод компенсации «off-line» основан на различии характеров развития в калориметре ливней, имеющих электромагнитную и неэлектромагнитную (адронную) природу. Это различие становится особенно выраженным при использовании поглотителей с большим значением атомного номера Z . Использование этого метода требует построения высокогранулярного калориметра.

Второй метод компенсации «off-line» основан на том факте, что вторичные частицы (электроны и позитроны) электромагнитного ливня остаются релятивистскими вплоть до энергий в несколько кэВ. Нерелятивистские протоны, возникающие в реакциях расщепления и упругого рассеяния на нейтронах, доминируют в адронных ливнях. Одновременная регистрация черенковского и сцинтилляционного излучения позволит точнее оценить вклад каждой компоненты и осуществить компенсацию калориметра [11].

Таким образом, PWO представляется идеальным кандидатом для реализации всех трех методов компенсации гибридного калориметра.

К настоящему времени нами предложены и проанализированы различные методы разделения черенковского и сцинтилляционного сигнала в PWO. Проведены теоретические исследования и моделирования взаимодействия различных частиц с PWO с целью оценки вкладов черенковского и сцинтилляционного сигналов. Исследованы возможности создания кристаллов PWO с модифицированными спектральными и сцинтилляционными характеристиками. Изготовлены экспериментальные кристаллы с различным световыходом для уравнивания сцинтилляционных и черенковских сигналов и оптимизации их разделения. Начата подготовка к экспериментальным измерениям, которые планируется провести во второй половине 2009 г.

3. Оценки выхода черенковского излучения в сцинтилляторе PWO в различных диапазонах длин волн

Нами проведены серии моделирований с целью оценки выхода черенковского излучения в сцинтилляторе PWO в различных диапазонах длин волн при прохождении пучков электронов и пионов под различными углами через кристалл с стандартными размерами элемента торцевой части калориметра CMS (ЦЕРН).

Три диапазона длин волн были выбраны для моделирований:

- 320–500 нм, который соответствует области чувствительности ФЭУ;
- 300–675 нм, который определен как область высвечивания сцинтилляций;
- 675–1000 нм, в котором отсутствуют сцинтилляционные сигналы и который пригоден для селективной регистрации черенковского излучения.

Результаты представлены на рис. 1–6. Моделирования выполнялись для случая кристаллов PWO, имеющих характеристики, аналогичные тем, которые будут использованы в эксперименте CMS, т. е. не оптимизированные для построения гибридного калориметра. Таким образом, данные моделирования дают нижнюю оценку. Отношение черенковского сигнала к сцинтилляционному может быть улучшено при использовании технологических мер, подавляющих сцинтилляционный выход PWO.

4. Исследование методов разделения черенковского и сцинтилляционного сигнала в PWO

Для разделения сигналов черенковского и сцинтилляционного света могут быть использованы четыре метода [20, 21]:

- посредством анализа спектров эмиссии;
- посредством анализа временных характеристик сигналов;
- посредством использования факта направленности черенковского излучения в отличие от изотропного света сцинтилляций;
- посредством использования факта поляризованности черенковского излучения в отличие от неполяризованного света сцинтилляций.

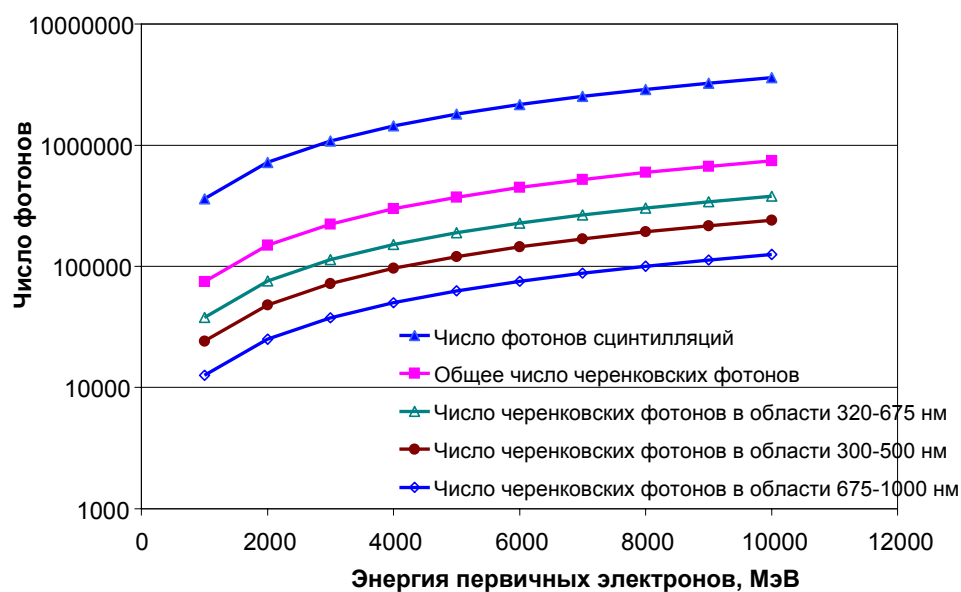


Рис. 1. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения электронами различных энергий. Угол падения пучка электронов на кристалл 0°

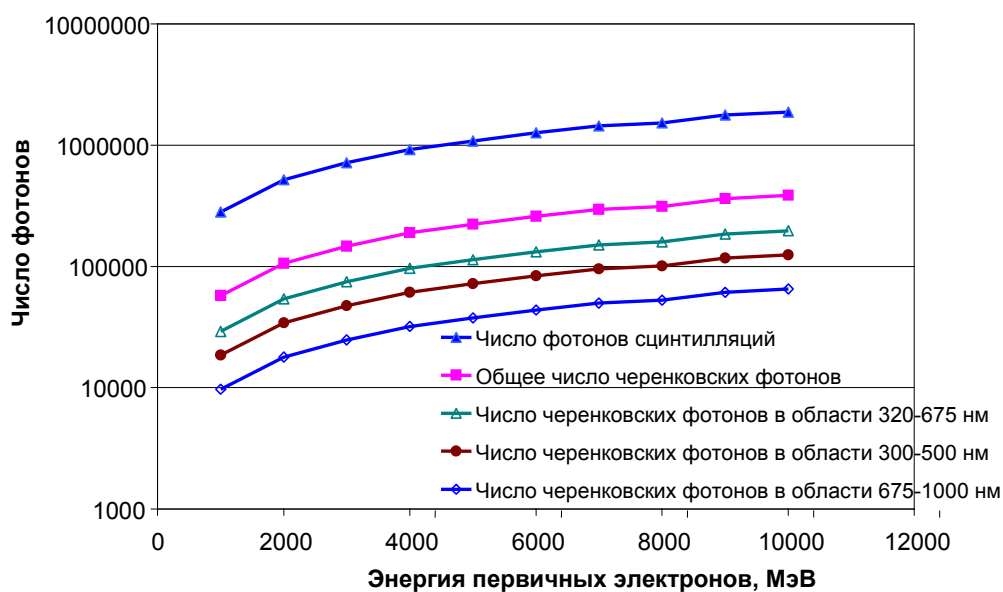


Рис. 2. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения электронами различных энергий. Угол падения пучка электронов на кристалл 25°

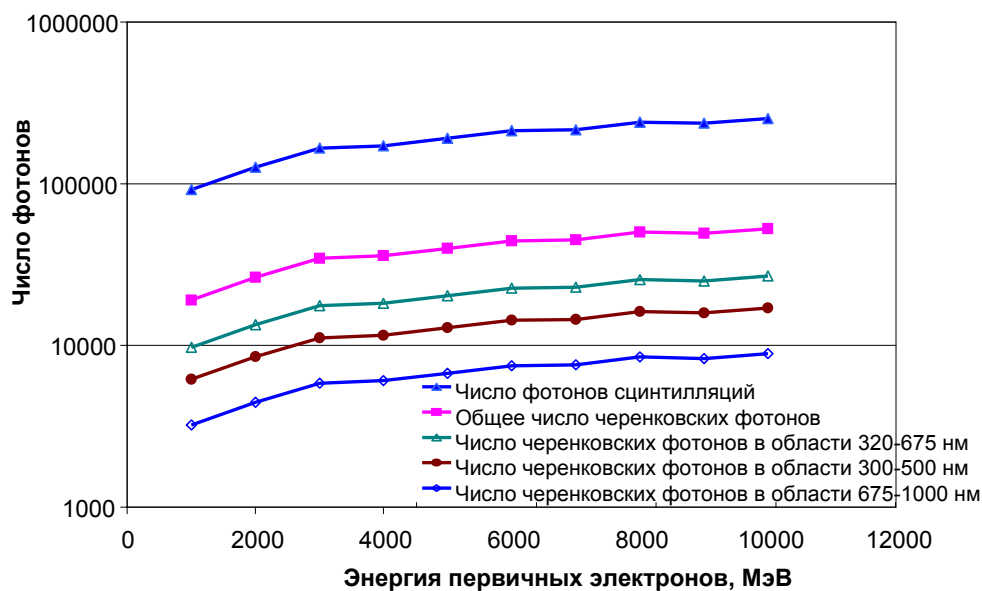


Рис. 3. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения электронами различных энергий. Угол падения пучка электронов на кристалл 90°

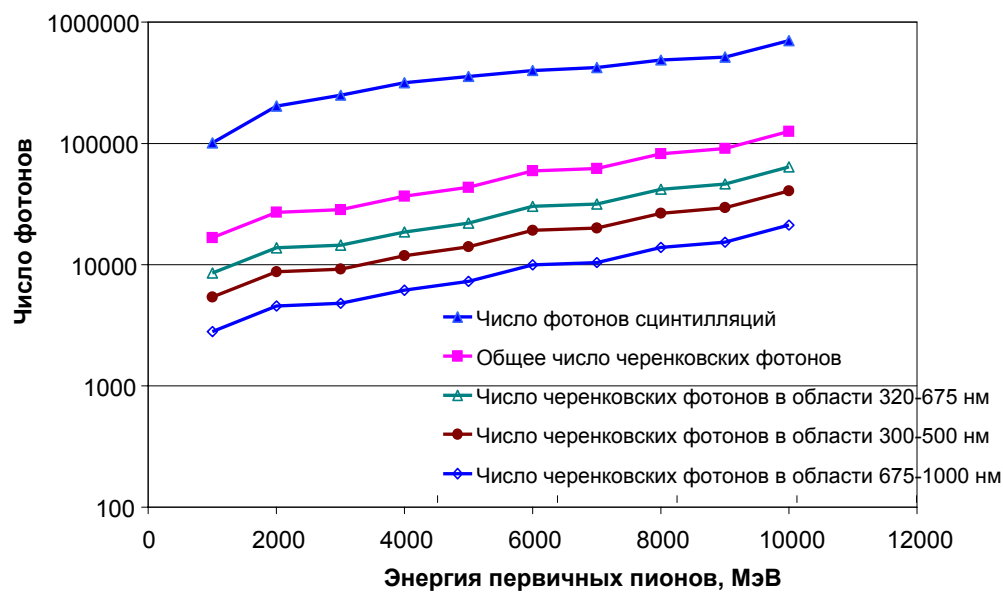


Рис. 4. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения пионами различных энергий. Угол падения пучка пионов на кристалл 0°

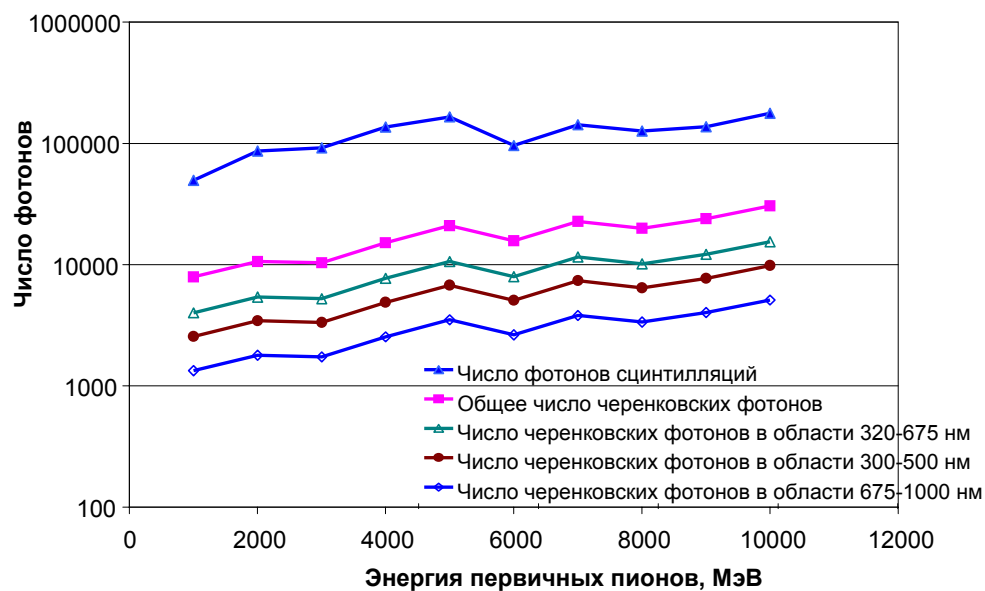


Рис. 5. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения пионами различных энергий. Угол падения пучка пионов на кристалл 25°

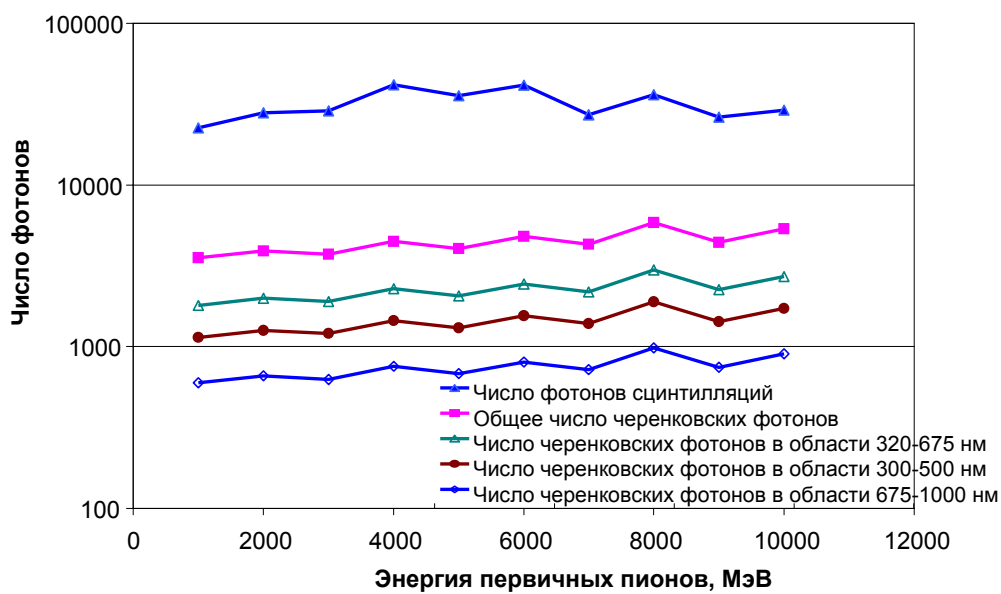


Рис. 6. Число сцинтилляционных и черенковских фотонов, возникающих в кристалле PWO под действием облучения пионами различных энергий. Угол падения пучка пионов на кристалл 90°

К настоящему времени нами проведен предварительный анализ различных методов разделения. Для экспериментального подтверждения проведенных моделирований и установления оптимального метода или комбинации методов разделения черенковского и сцинтилляционного излучения в PWO планируется провести серию экспериментальных исследований на пучках высоких энергий в ЦЕРНе. Для экспериментов будут использованы как стандартные сцинтилляционные элементы PWO для эксперимента CMS, так и кристаллы с модифицированными спектральными и сцинтилляционными характеристиками.

4.1. Метод разделения по спектральной области

Применение этого метода основано на том, что спектр сцинтилляций PWO локализован в полосе с максимумом порядка 420 нм, в то время как черенковское излучение можно, в первом приближении, считать распределенным изотропно в широком спектральном диапазоне. В случае кристаллов PWO, имеющих характеристики, аналогичные тем, которые будут использованы в эксперименте CMS, можно осуществить регистрацию сцинтилляционного света в области высвечивания сцинтилляций, а регистрацию черенковского излучения – в диапазоне 675–1000 нм. Разделение может быть осуществлено с помощью фотодетектора со специальным селектором (красный оптический фильтр с краем спектрального диапазона пропускания 690 нм).

4.2. Метод временного разделения

Метод основан на различиях во временных характеристиках сигналов – черенковское излучение возникает практически мгновенно и продолжается в течение прохождения релятивистской заряженной частицы через среду, в то время как сцинтилляции в PWO возникают с задержкой, содержат несколько затухающих компонент и достигают максимума через 6–11 нс после поглощения энергии частицы сцинтиллятором. Поэтому разделение сигналов может осуществляться посредством анализа формы импульса и времени высвечивания.

4.3. Метод анализа углового распределения

Метод основан на пространственной анизотропии черенковского излучения. Черенковские фотоны излучаются в конус, соосный траектории заряженной частицы, в то время как сцинтилляционное излучение пространственно изотропно.

Следует отметить, что анизотропия распространения черенковского излучения в длинных кристаллах PWO сохранится и при использовании кристаллов с диффузными отражающими поверхностями, поскольку отражение света от шлифованных поверхностей анизотропно [4].

4.4. Метод разделения по поляризации излучения

Этот метод основан на факте поляризованности черенковского излучения в отличие от неполяризованного сцинтилляционного.

5. Исследование возможности создания кристаллов PWO с модифицированными спектральными и сцинтилляционными характеристиками

Как видно из результатов моделирований, в стандартных кристаллах PWO при регистрации частиц одной и той же энергии сцинтилляционный сигнал на порядок – два превосходит сигнал черенковского излучения. Столь значительный динамический диапазон затрудняет регистрацию черенковского излучения. Отношение черенковского сигнала к сцинтилляционному может быть улучшено при использовании технологических мер, подавляющих сцинтилляционный выход PWO. Некоторое уменьшение световыхода сцинтиллятора PWO не является в данном случае критическим, так как данные сцинтилляционные элементы предназначены для регистрации частиц высоких энергий (десятки и сотни ГэВ). На рис. 7 представлены амплитудные спектры трех кристаллов PWO, измеренные с помощью ФЭУ ХР 2020 при облучении гамма квантами с энергией 1.25 МэВ от источника Co^{60} . Образец № 4073 является стандартным элементом калориметра эксперимента CMS, образцы № 127-78 и №127-81 – специально выращенные кристаллы с подавленным световыходом сцинтилляций. Измеренные характеристики приведены в следующей таблице.

Номер кристалла	Световыход, фотоэлектрон/МэВ (ФЭУ ХР 2020)
4073	12.3
127-78	6
127-81	5.9

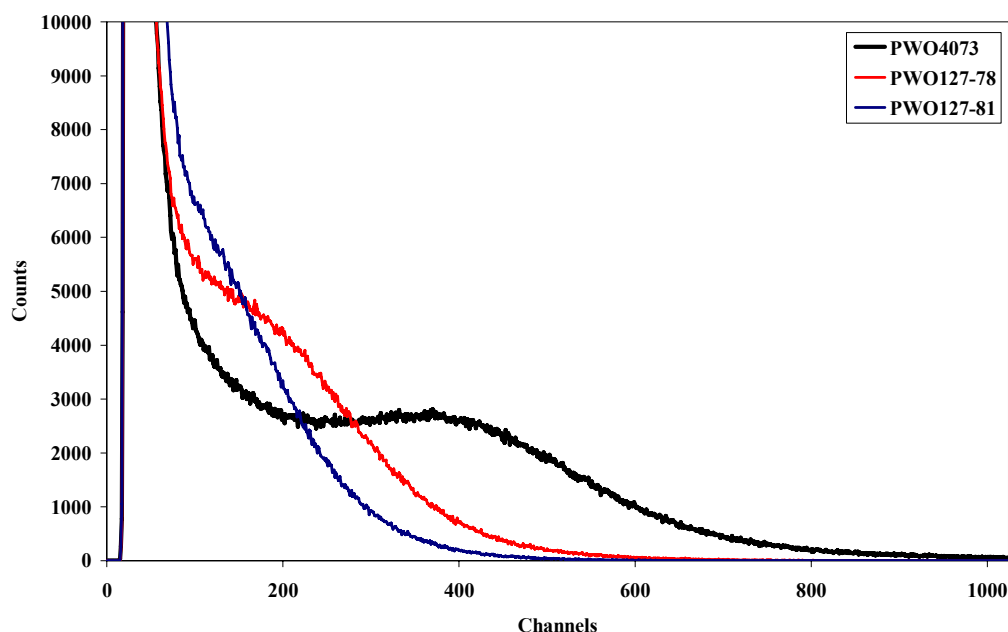


Рис. 7. Амплитудные спектры трех кристаллов PWO, измеренные с помощью ФЭУ ХР 2020 при облучении гамма квантами с энергией 1.25 МэВ от источника Co^{60}

6. Заключение

В ходе исследований предложены и изучены различные методы разделения черенковского и сцинтилляционного сигнала в PWO. Показана принципиальная возможность использования этих методов. Окончательный выбор наилучшего метода или комбинации будет сделан по результатам экспериментальных измерений на пучке высоких энергий. Такие измерения планируется провести во второй половине 2009 г. в ЦЕРНе.

Проведены теоретические исследования и моделирования взаимодействия различных частиц с PWO с целью оценки вкладов черенковского и сцинтилляционного сигналов в различных диапазонах длин волн. Для немодифицированных кристаллов PWO при регистрации частиц одной и той же энергии сцинтилляционный сигнал на порядок – два превосходит сигнал черенковского излучения, что делает использование кристаллов для одновременной регистрации черенковского и сцинтилляционного сигналов возможным, однако, неоптимальным.

Исследованы возможности создания кристаллов PWO с модифицированными спектральными и сцинтилляционными характеристиками. Изготовлены экспериментальные кристаллы со световыходом, в два раза ниже световыхода немодифицированных кристаллов PWO при сохранении остальных потребительских характеристик (спектральный диапазон высвечивания, поглощение, радиационная стойкость) для уравнивания сцинтилляционных и черенковских сигналов и оптимизации их разделения.

Результаты планируемых исследований имеют важное значение для работ по созданию нового поколения экспериментальных установок для фундаментальных исследований по физике высоких энергий. В использовании результатов планируемых исследований заинтересованы, в частности, научные группы, планирующие проведение экспериментов в ЦЕРН (Швейцария).

7. Благодарности

Авторы выражают благодарность доктору П. Лекоку из ЦЕРНа за помощь в организации проведения экспериментальных исследований в ЦЕРН.

Литература

1. Particle data group. LBNL // Phys. Rev. D. Particles and fields. Part 1. Review of particle physics. 1996. Vol. 54. P. 77.
2. *Gunion J. F., Haber H. E.* et al. The Higgs Hunter's Guide. 1990.
3. *Denegri D.* // CMS TN. 1995. № 167. 24 p.
4. The Compact Muon Solenoid. Technical Proposal CERN/LHCC 94-38. 1994.
5. *Virdee T.* // CMS TN. 1995. № 168. 16 p.
6. *Bomeštar D.* // CMS TN. 1995. № 156. 8 p.
7. *Iashvili I.* // CMS CR. 1998. № 013. 6 p.
8. CMS. The Electromagnetic Calorimeter Technical Design Report. CERN/LHCC 97-33. CMS TDR4. 15 December 1997.
9. International Linear Collider. <http://www.linearcollider.org/cms/>
10. The Compact Linear Collider. <http://cllc-study.web.cern.ch/cllc%2Dstudy/>

11. *Wigmans R.* // International Series of Monographs on Physics. Vol. 107. 2000.
12. *Akchurin N., Wigmans R.* // Rev. Sci. Instr. 2003. Vol. 74. P. 2955.
13. *Akchurin N., Carrell K. et al.* // NIM. 2004. Vol. A 533. P. 305.
14. *Akchurin N., Carrell K. et al.* // NIM. 2005. Vol. A 536. P. 29.
15. *Akchurin N., Carrell K. et al.* // NIM. 2005. Vol. A 537. P. 537.
16. *Akchurin N., Carrell K. et al.* // NIM. 2005. Vol. A 548. P. 336.
17. *Akchurin N., Atramentov O. et al.* // NIM. 2005. Vol. A550. P. 185.
18. *Annenkov A., Korzhik M. et al.* // IEEE'2000 Abstr. NSS-527. 2000. 3 p.
19. ALICE Technical Proposal, CERN/LHC 95–71, 15 December 1995.
20. *Akchurin N., Carrell K. et al.* // NIM. 2005. Vol. A 548. P. 336.

APPLICATION OF PWO CRYSTALS FOR CONSTRUCTION OF COMPENSATED HYBRID CALORIMETERS FOR EXPERIMENTAL HIGH ENERGY PHYSICS

**G. Yu. Drobychev, A. E. Borisevich, V. I. Dormenev, M. V. Korjik,
A. E. Karneyeu, V. A. Mechinsky**

Different methods for separation of Cherenkov and scintillation light from PWO scintillator were studied. A possibility of use of PWO crystals for simultaneous registration of Cherenkov and scintillation signals was proved. Possibilities to produce PWO scintillators with modified spectral and scintillation characteristics were studied. Experimental crystals with reduced scintillation yield were produced and tested.

ПОИСК ТЯЖЕЛОГО НЕЙТРИНО В ЭКСПЕРИМЕНТЕ CMS НА LHC

С. Н. Гниненко*, Г. Ю. Дробышев, М. М. Кирсанов*,
А. Е. Корнеев, Н. В. Красников*, В. А. Матвеев*

Лево-правая симметричная модель $SU_C(3) \otimes SU_L(2) \otimes SU_R(2) \otimes U(1)$ [1] объясняет причину нарушения четности при слабых взаимодействиях и предсказывает существование дополнительных калибровочных бозонов W_R и Z' . Также в этой модели естественным образом возникают тяжелые правосторонние майорановские состояния нейтрино (N_l), которые могут быть партнерами легких состояний нейтрино, объясняя, таким образом, ненулевую массу нейтрино посредством механизма «качели» (seesaw). Поэтому поиск калибровочных бозонов W_R, Z' и тяжелых нейтрино N_l представляется важным и интересным.

В рамках этой модели мы изучаем возможность регистрации распада W_R и N_l при протон-протонных взаимодействиях на ускорителе LHC. Показано, что сигнал можно выделить с малым уровнем фона. Для интегральной светимости LHC в $L = 30 \text{ фб}^{-1}$ и уровня достоверности 5σ возможно открытие W_R и N_l с массами до 4 и 2.4 ТэВ соответственно.

1. Лево-право симметричная модель

Среди нескольких расширений [2] Стандартной модели (СМ), которые могли бы быть проверены на LHC, лево-правая симметричная модель представляется одной из самых интересных. Эта модель включает в себя СМ и естественным образом объясняет нарушение четности при слабых взаимодействиях как результат спонтанного нарушения четности. Модель включает в себя дополнительные калибровочные бозоны W_R и Z' и тяжелые правосторонние майорановские состояния нейтрино N_l , которые могут быть партнерами легких состояний нейтрино ν_l ($l = e, \mu, \tau$), объясняя, таким образом, ненулевую массу нейтрино посредством механизма «качели» (seesaw) [3]. Модель представляется весьма интересной, поскольку результаты последних экспериментов [4] подтверждают существование осцилляций нейтрино, что является указанием на массивность нейтрино. Несмотря на то что упомянутые эксперименты весьма впечатляющи, они не объясняют ни природу возникновения массы (т. е. не делают различия между дираковскими и майорановскими нейтрино), ни ее значения. Единственный факт, позволяющий предпочесть одни модели по сравнению с другими – это то, что масса нейтрино значительно меньше массы заряженных лептонов и кварков. С другой стороны, поиск сигнала от N_l в диапазоне энергий LHC выглядит многообещающим, поскольку большое количество расширений лево-правой симметричной модели предсказывают массу тяжелого нейтрино в диапазоне от нескольких сотен ГэВ до нескольких ТэВ [2].

*Институт ядерных исследований, Москва.

2. Образование и распад тяжелого майорановского нейтрино

На LHC возможно изучение двух типов реакций с образованием N_l и W_R :

1) $p + p \rightarrow W_R + X \rightarrow N_l + l + X$;

2) $p + p \rightarrow Z' \rightarrow 2N_l + X$,

с последующим распадом $N_l \rightarrow l + j_1 + j_2$ [5, 6].

Соответствующие фейнмановские диаграммы показаны на рис. 1.

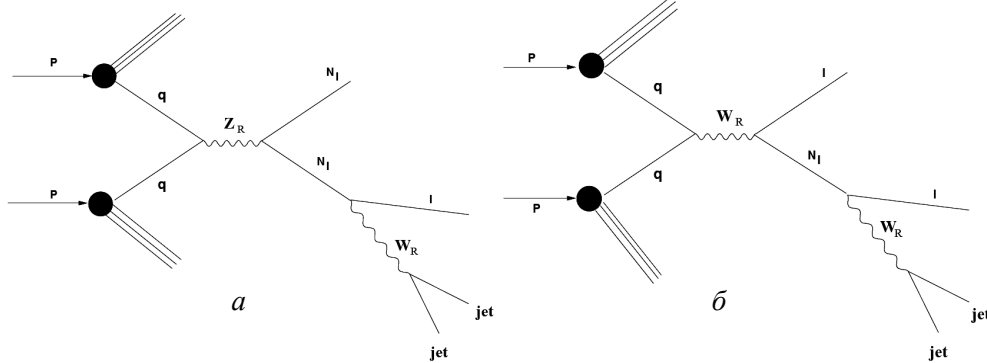


Рис. 1. Фейнмановские диаграммы образования тяжелого нейтрино через: $a - Z'$ бозон; $b - W_R$ бозон

Сечение реакций зависит от следующих параметров модели:

- значения константы связи g_R ;
- масс N_l и W_R ;
- параметров матрицы смешивания СМК для правостороннего сектора;
- силы смешивания $W_R - W_L$ and $Z' - Z$.

Для упрощения нашего исследования мы используем следующие общепринятые предположения:

- углы смешивания малы;
- правосторонняя СМК матрица равна левосторонней;
- $g_R = g_L$.

При этих условиях реакция через Z' имеет меньшее сечение и более сложный канал распада (signature), поэтому для нашего исследования мы ограничились реакцией, идущей с образованием и распадом W_R .

В качестве контрольной точки мы используем $M(N_l) = 500$ ГэВ и $M(W_R) = 2$ ТэВ.

3. Моделирование сигнала и фона

Моделирование событий проводилось с помощью пакетов PYHTIA [7] и ALPGEN [8] (вычисление сечений и генерация событий) и CMSSW (отклик детектора и реконструкция событий).

Для анализа выбираются события, соответствующие конечному состоянию при распаде через W_R , т. е. с двумя лептонами и минимум двумя адронными струями (при этом используется две с наибольшим поперечным импульсом). Затем на основании 4-импульсов пары струй и пары лептонов вычисляется инвариантная масса $M(W_R) = M(jjll)$. Интерес представляет пик в распределении $M(W_R)$.

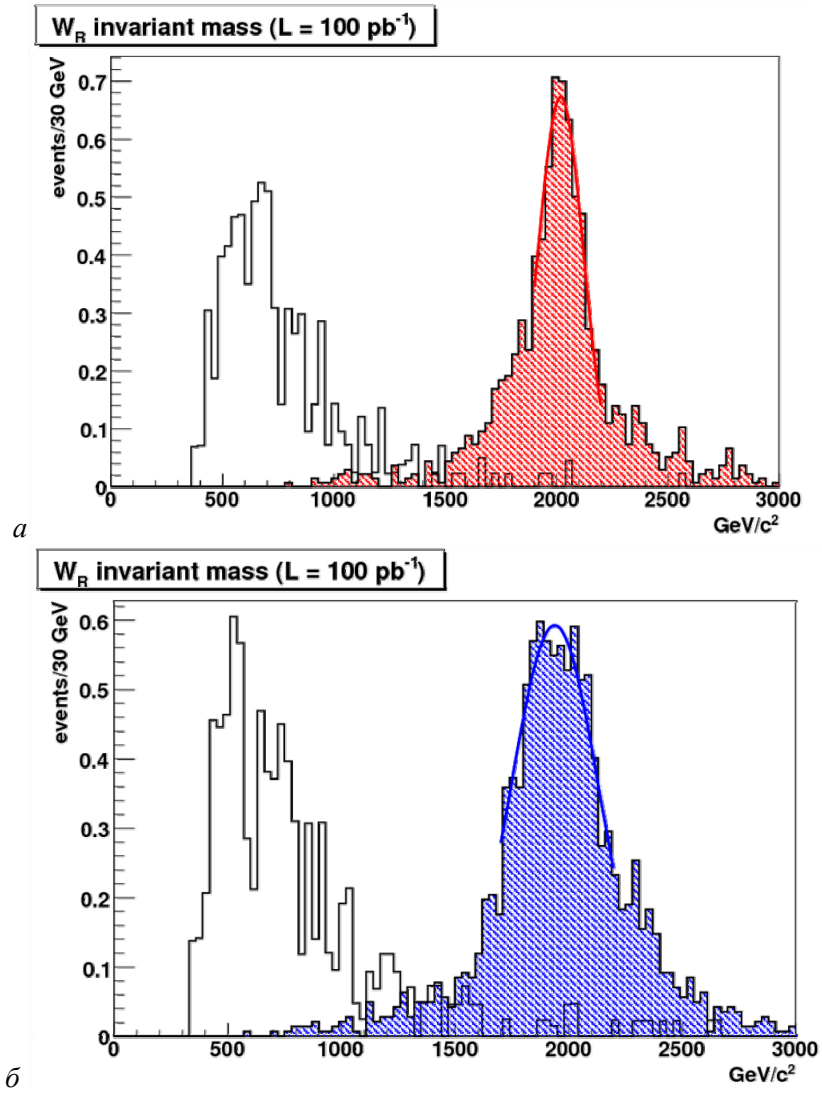


Рис. 2. Распределения восстановленной инвариантной массы W_R бозона для различных каналов распада: a – электронный канал; b – мюонный канал. Закрашенная область – сигнал; пустая – фон

Наиболее существенный вклад в фон вносят события образования $t\bar{t}$ и $Z + jet$. Сечения обеих реакций на несколько порядков превышают сечение сигнала. Поэтому для выделения сигнала из фона применяется дополнительная фильтрация событий. Наиболее эффективной себя показала фильтрация по порогу инвариантной массы пары лептонов $M(l\bar{l})$. На рис. 2 показаны распределения инвариантной массы $M(W_R)$ при отборе $M(l\bar{l}) > 200 \text{ ГэВ}$. Видно, что пики от распадов калибровочного бозона W_R и тяжелого нейтрино N_l отчетливо идентифицируются.

4. Заключение

Статистическая значимость открытия событий с N_e и W_R на детекторе CMS рассчитана с помощью следующего соотношения [9]:

$$S = 2 \cdot (\sqrt{N_s + N_B} - \sqrt{N_B}) \geq 5,$$

где N_s и N_B количество сигнальных и фоновых событий соответственно.

Соответствующая диаграмма, иллюстрирующая области исключенных значений масс N_e и W_R , представлена на рис. 3.

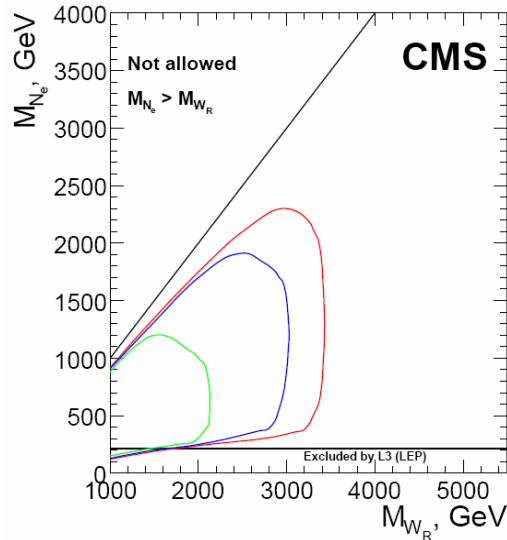


Рис. 3. Области исключенных значений масс W_R и N_l на детекторе CMS для различных значений интегральной светимости $L = 1, 10, 30 \text{ фб}^{-1}$ (соответственно 1 месяц, 1 год, 3 года работы LHC)

В статье мы представили результаты изучения возможности регистрации тяжелого правостороннего майорановского нейтрино N_l и тяжелого калибровочного бозона W_R на детекторе CMS. Для интегральной светимости в 30 фб^{-1} эти частицы могут наблюдаться с массами до 2.4 и 4 ТэВ соответственно. В нашей контрольной точке (массы 0.5 и 2 ТэВ соответственно) частицы могут быть обнаружены уже после 1 месяца работы LHC.

Литература

1. Pati J. C., Salam A. // Phys. Rev. D. 1974. Vol. 10. P. 275; Mohapatra R. N., Pati J. C. // Phys. Rev. D. 1975. Vol. 11. P. 366; Senjanovic G., Mohapatra R. N. // Phys. Rev. D. 1975. Vol. 12. P. 1502.
2. Krasnikov N. V., Matveev V. A. // arXiv: hep-ph/0309200.
3. GellMann M., Ramon P., Slansky R. // Super Gravity. 1979; Yanagida T. // Proc. Workshop on the Unified Theory and the Baryon Number in the Universe. 1979; Mohapatra R. N., Senjanovic G. // Phys. Rev. Lett. 1980. Vol. 44. P. 912.

4. *Giunti C., Laveder M.* // arXiv:hep-ph/0310238.
5. *Tso-hsiu H., Cheng-rui C., Zhijian T.* // Phys. Rev. D. 1990. Vol. 4. P. 2265.
6. *Data A., Guchait M., Roy D. P.* // Phys. Rev. D. 1993. Vol. 47. P. 961.
7. *Sjostrand T.* // Comput. Phys. Commun. 1994. Vol. 82. P. 74; *Sjostrand T.* // Computer Physics Commun. 1986. Vol. 39. P. 347; *Bengtsson H., Sjostrand T.* // Computer Physics Commun. 1987. Vol. 43. P. 367.
8. *Mangano M. L., Moretti M. et al.* // JHEP 2003. 0307:001.
9. *Bityukov S. I., Krasnikov N.V.* // CMS CR 2002/05, hep-ph/0204326; *Bityukov S. I., Krasnikov N.V.* // Mod. Phys. Lett. 1998. Vol. A13. P. 3235.

SEARCH FOR HEAVY NEUTRINO ON CMS EXPERIMENT AT LHC

**S. N. Gninenko*, G. Yu. Drobychev, M. M. Kirsanov*, A. E. Korneev,
N. V. Krasnikov*, V. A. Matveev***

The $SU_C(3) \otimes SU_L(2) \otimes SU_R(2) \otimes U(1)$ left-right (LR) symmetric model [1] explains the origin of the parity violation in weak interactions and predicts the existence of additional gauge bosons W_R and Z' . In addition, heavy right-handed Majorana neutrino states N_l arise naturally within LR symmetric model. The N_l could be partners of light neutrino states, related to their non-zero masses through the see-saw mechanism. This makes the searches of W_R , Z' and N_l interesting and important. In the framework of the LR model we study the possibility to observe signals from N_l and W_R production in pp collisions at LHC. We show that their decay signals can be identified with a small background. For the integral LHC luminosity of $L = 30 \text{ fb}^{-1}$, the 5σ discovery of W_R -boson and heavy Majorana neutrinos N_l with masses up to 4 TeV and 2.4 TeV respectively is found possible.

* Institute for Nuclear Research, Moscow.

КОГЕРЕНТНОЕ ТОРМОЗНОЕ И ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ (КТПРИ)

В. Г. Барышевский, К. Г. Батраков, А. О. Грубич, А. А. Гуринович,
А. С. Лобко, А. А. Ровба, П. Ф. Сафронов, В. И. Столярский,
Б. А. Тарнопольский, А. П. Ульяненок*, И. Д. Феранчук**

1. Рентгеновское излучение нерелятивистских электронов в кристаллах

При уменьшении энергий электронов от релятивистских в область порядка десятков-сотен кэВ интерференция излучаемого ими в кристаллических мишенях параметрического рентгеновского излучения (ПРИ) и когерентного тормозного излучения (КТИ) становится все более существенной, в результате чего формируется суммарное когерентное рентгеновское излучение [1]. Поскольку его нельзя экспериментально разделить на компоненты, ниже будем называть его КТИ и ПРИ нерелятивистских электронов (КТПРИ). Действительно (см. рис. 1, а), в случае излучения релятивистских частиц, проходящих через кристалл, фоновое излучение, обусловленное иными, чем ПРИ, механизмами генерации (некогерентное и когерентное тормозное излучение, переходное излучение), сосредотачивается в узком конусе с раствором $\Delta\theta \sim \gamma^{-1} = mc^2/E$ в направлении движения пучка частиц. Квазимонохроматическое же излучение, возникающее в направлениях, определяемых брэгговскими углами, генерируется только по механизму ПРИ. В результате процесс излучения в рефлекс виртуально свободен от фона и поэтому может быть зарегистрирован даже детектором с низким спектральным разрешением.

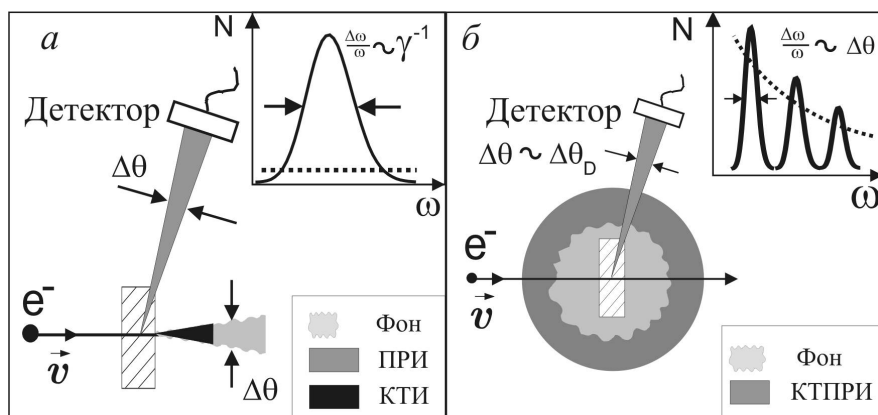


Рис. 1. Пространственные распределения интенсивности рентгеновского излучения для релятивистских (а) и нерелятивистских (б) электронов. На вставках показана спектральная структура пиков

* Bruker AXS, Germany.

** Физический факультет БГУ.

В случае нерелятивистских электронов угловое распределение фонового излучения становится практически изотропным (рис. 1, б). Вследствие этого рефлекс излучения, обусловленные когерентными эффектами, будут наблюдаться в присутствии интенсивного пространственно-однородного фона, а форма их спектров во многом будет определяться спектральным разрешением детектора и его угловой апертурой. Таким образом, экспериментальное исследование когерентного рентгеновского излучения нерелятивистских электронов принципиально возможно только с помощью коллимированных («точечных») детекторов с высоким спектральным разрешением.

Первые известные эксперименты по исследованию излучения нерелятивистских электронов в кристаллах были посвящены изучению когерентного тормозного рентгеновского излучения от нерелятивистских электронов и проводились с использованием в качестве источника пучка электронного микроскопа на мишени из LiF [2]. Невысокое разрешение системы регистрации на базе пропорционального счетчика (~17 % на 6 кэВ) позволило тем не менее зарегистрировать спектры КТПРИ благодаря в первую очередь использованию в качестве мишени весьма тонкой (~500–1000 Å) кристаллической пленки из LiF.

Позднее рентгеновское излучение нерелятивистских электронов в кристаллах достаточно подробно исследовалось с помощью полупроводниковых детекторов [3–5], которые обеспечивали более высокое разрешение, чем пропорциональный счетчик в [2]. Несмотря на повышение технического уровня измерений, результаты этих экспериментов не были интерпретированы количественно, так как их авторы при описании учитывали только механизм КТИ. Появление теории [1, 6, 7], в которой была введена модель КТПРИ, позволило более адекватно описать излучение нерелятивистских электронов в кристаллических мишенях и провести количественную интерпретацию нескольких ранних экспериментов.

Однако уже в первом эксперименте [2] были качественно установлены некоторые характерные особенности КТПРИ:

- зависимость положения (частоты) пиков от энергии электронов;
- зависимость частоты излучения от угла ориентации мишени;
- возникновение нескольких пиков, соответствующих различным порядкам отражения;
- уширение пиков в зависимости от структурного совершенства мишени.

Наиболее подробное и всестороннее исследование КТПРИ из известных до настоящего времени экспериментов представлено в работе [3]. Были установлены зависимости параметров излучения от энергии пучка в диапазоне 60–120 кэВ, углов ориентации мишеней из различных материалов (медь, железо, никель, кремний, алюминий и Ni₃Al) относительно оси пучка, детекторов (характерное энергетическое разрешение ~150 эВ) относительно мишеней, а также толщины и температуры мишени. Из результатов измерений в частности следует, что из всех экспериментальных требований для генерации КТПРИ наиболее существенным является условие использования весьма тонкой (100–300 нм) кристаллической мишени высокой степени совершенства. Учитывая, что ее площадь должна быть достаточно велика для обеспечения работы с большим

током пучка и реализации упомянутой выше возможности получения достаточно высокого выхода монохроматического рентгеновского излучения, создание таких мишеней представляет собой непростую технологическую проблему.

2. Характеристики КТПРИ нерелятивистских электронов

Теория КТПРИ детально изложена в [1, 7–9]. Рассмотрим подробнее существенные особенности излучения, которые определяют требования к условиям его экспериментального наблюдения, следуя в основном [8, 9].

Качественно особенности КТПРИ можно объяснить с привлечением концепции псевдофотонов. В рамках этого подхода любой механизм излучения может рассматриваться как конвертор псевдофотонов в реальные фотоны, испускаемые в спектральном интервале, зависящем от типа взаимодействия заряженной частицы и внешнего поля. В этом случае универсальная оценка спектрально-углового распределения фотонов, генерируемых электронным пучком в единицу времени при взаимодействии с веществом или внешним полем, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial^2 N_s}{\partial \omega \partial \vec{n}} \simeq \frac{\alpha}{4\pi c^4} (\vec{e}_s \vec{v})^2 R(\omega, \vec{n}, E) L_{coh}^2(\omega, \vec{n}, E) \omega \frac{I}{e}. \quad (1)$$

Здесь α – постоянная тонкой структуры; $\vec{e}_s$ – вектор поляризации фотона с частотой ω ; $\vec{n}$ – единичный вектор, определяющий направление испускания фотона; I – количество электронов с энергией E и скоростью $\vec{v}$, прошедших через область взаимодействия в единицу времени.

Безразмерный коэффициент $R(\omega, \vec{n}, E)$ определяет вероятность трансформации псевдофотона в реальный фотон с волновым вектором $\vec{k} = \omega \vec{n}$. Величина этой вероятности зависит от механизма излучения и удовлетворяет неравенству

$$R(\omega, \vec{n}, E) \leq 1. \quad (2)$$

Когерентная длина L_{coh} определяется кинематикой взаимодействия между электроном и полем излучения и по значению может быть оценена как наименьший из следующих параметров:

$$L_{coh} = \min \left\{ L, L_a = \frac{2}{\omega \varepsilon''}, L_{el} = [p_z - p_{fz} - k_z]^{-1} \equiv q_z^{-1} \right\}, \quad (3)$$

где $q_z = p_z - p_{fz} - k_z$ – проекция переданного импульса на направление скорости электрона; $\vec{p}$ и $\vec{p}_f(E_f)$ – импульс электрона в начальном и конечном состояниях; $E_f = E - \hbar\omega$; L – толщина мишени вдоль траектории электрона.

При условии $\omega \ll E$ параметр L_{el} равен

$$L_{el} \simeq \frac{1}{\omega [1 - (\vec{v}\vec{n}) \varepsilon'/c]},$$

$$L_{el} \simeq \frac{2}{\omega[2(1-\varepsilon')+\gamma^{-2}]}, \text{ если } \gamma = \frac{E}{mc^2} \gg 1. \quad (4)$$

В (3) – (4) ε' и ε'' – действительная и мнимая части коэффициента преломления среды. Физический смысл L_{coh} заключается в том, что это длина пути электрона в веществе, на котором испущенные фотоны являются когерентными.

Выражение (1) показывает, что при постоянной энергии электрона отношение интенсивностей различных излучательных механизмов определяется коэффициентами преобразования (2) и когерентной длиной. Для излучения Вавилова – Черенкова L_{coh} достигает максимального значения при условии $q_z = 0$ и внутри спектрального интервала, удовлетворяющего неравенству $\varepsilon' > 1$. Для ПРИ значение $R(\omega, \vec{n}, E)$ равно коэффициенту брэгговского отражения от кристаллографических плоскостей и оно стремится к единице для фотонов с вектором $\vec{k}$, лежащим вблизи сферы Эвальда. Таким образом, максимальная интенсивность ПРИ соответствует случаю, когда условие дифракции Брэгга

$$(\vec{k} + \vec{\tau})^2 = k^2 \quad (5)$$

выполняется одновременно с условием Вавилова – Черенкова

$$p_z - p_{fz} - k_z = 0. \quad (6)$$

Такая ситуация возможна для релятивистских частиц с энергией $E \gg m$, причем для электрона эта энергия должна быть больше чем ~50 МэВ [10].

Если (6) не выполняется точно, но условие $\gamma \gg 1$ еще действительно, величина L_{el} пропорциональна γ^2 , а величина $(\vec{e}_s \vec{v})$ пропорциональна характерному углу вылета фотонов $\Delta\theta \sim 1/\gamma$. В целом спектральная плотность излучения будет зависеть от энергии частицы следующим образом:

$$\frac{\partial^2 N}{\partial \omega \partial \vec{n}} \sim E^2. \quad (7)$$

В работе [11] была сделана попытка подтвердить эту зависимость экспериментально в диапазоне энергий пучка 5–20 МэВ, но выполненная там аппроксимация параболой всего через три полученные точки выглядит не вполне убедительно.

При понижении энергии пучка от привычных по экспериментам с ПРИ десятков и сотен МэВ до, к примеру, характерных для рентгеновских трубок 100 кэВ, квантовый выход излучения уменьшится в $\sim 10^6$ раз по сравнению с максимально достижимым значением. Однако это уменьшение может быть скомпенсировано значительным увеличением тока, достижимым в низковольтных установках, по сравнению с ускорителями на высокие энергии.

Еще одним отличительным свойством КТПРИ является его угловое распределение, что налагает особые требования на схему детектирования. Как уже

упоминалось в п. 1, в случае нерелятивистских электронов угловые распределения всех типов излучения становятся практически изотропными (рис.1). Пики КТПРИ «тонут» в фоне тормозного излучения и поэтому принципиально могут быть зарегистрированы только детектором с высоким спектральным и угловым разрешением.

Существенным фактором, влияющим на экспериментальную наблюдаемость КТПРИ, также остается многократное рассеяние. Поскольку заряженные частицы при прохождении через мишень испытывают упругие и неупругие столкновения, угловое и энергетическое распределения электронов в пучке будут меняться. Влияние рассеяния электронов на характеристики КТПРИ станет заметным, если либо полуширина распределения скорости $\Delta v/v$ или полуширина углового распределения электронов в пучке $\Delta \vartheta$ станет равной или большей полуширины спектральной линии излучения $1/kL$, где k – волновой вектор испущенного фотона, L – длина пути электрона в мишени. Оценки влияния многократного и неупругого рассеяния, выполненные для нескольких типов кристаллов в широком диапазоне частот излучения, дали достаточно жесткие требования на величину толщины мишени и параметры электронного пучка. Установлено, что для наблюдения КТПРИ толщина кристаллической мишени не должна превышать значения ~ 0.5 мкм, энергия пучка должна быть не менее 50–60 кэВ и начальные разбросы по энергии и углам должны быть не более 0.01.

Влияние многократного рассеяния на регистрируемые спектры можно несколько снизить, если регистрировать излучение под скользящим углом $\psi \ll 1$ относительно поверхности мишени. В этом случае будут регистрироваться только фотоны, испущенные на пути $\sim \psi L_a$, где L_a – длина поглощения. Таким образом, в спектрах будет фиксироваться только излучение, испущенное на начальной (с малой дисперсией в силу $\overline{\theta_s^2} \sim L$) части траектории пучка в мишени.

Фотоны КТПРИ излучаются во всех направлениях, их частота зависит как от угла θ_0 между скоростью электронов и системой кристаллографических плоскостей, так и от угла наблюдения φ между скоростью электронов $\vec{v}$ и направлением наблюдения:

$$\omega_n(\theta) = \frac{2\pi v \cos \theta_0}{d \left(1 - \frac{v}{c} \cos \varphi\right)} n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (8)$$

где d – межплоскостное расстояние; c – скорость света.

Спектр КТПРИ состоит из набора гармоник со спектральными ширинами, определяемыми помимо толщины мишени L (собственная ширина), угловым разрешением детектора $\Delta \theta_D$ и углом многократного рассеяния электронов θ_s :

$$\frac{\Delta \omega}{\omega_n} \approx \left[\left(\frac{v}{L \omega_n(\theta)} \right)^2 + \frac{v^2 \cos^2 \theta}{c^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)} \Delta \theta_D^2 + K^2 \overline{\theta_s^2} \right]^{1/2}, \quad (9)$$

$$K = \left| \vec{\tau}_\perp \left(1 - \frac{\vec{v}\vec{n}}{c} \right) + \vec{n}_\perp \frac{\vec{v}\vec{\tau}}{c} \right|.$$

Фактор K определяется геометрией эксперимента, $\vec{n}$ – нормаль к поверхности мишени. Правильный выбор расположения детектора, его оптимальной коллимации и ориентации кристалла позволяет минимизировать значение геометрического фактора K . Например, регистрация КТПРИ в направлении $\varphi \sim \pi/2$ детектором с угловой шириной $\Delta\theta_d < (\omega_n L/c)^{-1/2}$ позволит получить минимальную (близкую к естественной) спектральную ширину.

Известно, что среднеквадратический угол многократного рассеяния может быть выражен как $\overline{\theta_s^2}(L) \approx \frac{E_s^2}{E^2} \frac{L}{L_{rad}}$, где $E_s \approx 21$ МэВ, E – энергия электронов, выраженная в МэВ, и L_{rad} – радиационная длина вещества мишени. Когда $\theta_s > c/\omega_n L$, ширина линии КТПРИ определяется в основном многократным рассеянием. Напомним, что амплитуда гауссиана N_m соотносится с его интегральной интенсивностью N_0 как $N_m \sim N_0 / \Delta\omega$, поэтому увеличение угла многократного рассеяния приводит не только к уширению спектральной линии, но и к уменьшению ее амплитуды, что ухудшает условия ее регистрации при наличии интенсивного фона. Простая оценка показывает, что ширина линии КТПРИ излучаемого, например, электронами с энергией 100 кэВ в кремниевой ($L_{rad} = 10.32$ см) мишени толщиной 50 нм будет равна

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \sqrt{\overline{\theta_s^2}} \approx \frac{E_s}{E} \sqrt{\frac{L}{L_{rad}}} \approx 0.14,$$

что сравнимо со спектральным разрешением современных рентгеновских Si(Li) детекторов. Пик излучения в мишени толщиной 500 нм будет приблизительно в три раза шире, поэтому отношение сигнал/фон будет заметно меньше, чем для мишени толщиной 50 нм. Таким образом, толщина мишени является критическим параметром для экспериментов по наблюдению спектральных линий КТПРИ.

Возможность наблюдения эффекта детектором со спектральным разрешением $\Delta\omega/\omega$ можно оценить с помощью выражения для отношения интенсивностей КТПРИ и тормозного излучения [1]:

$$\eta \approx \frac{\rho}{\omega_n^3} \frac{6\pi^2 v}{\ln(137/Z^{1/3})} \frac{\omega_n}{\Delta\omega},$$

где ρ – концентрация рассеивателей.

Генерация КТПРИ в оптимальных условиях позволяет добиться максимальной яркости излучения. Количество монохроматических фотонов, испущенных в направлении $\vec{n}$ внутри определенной спектральной линии, может быть рассчитано по формуле:

$$\frac{\partial N_n}{\partial \vec{n}} \approx \frac{e^2}{8\pi^2 \hbar c} \omega_n L v |g_\tau|^2. \quad (10)$$

Оценка яркости B с помощью (10) для рефлекса (111) монокристаллической медной фольги толщиной 10 мкм при энергии электронов 120 кэВ и среднем токе пучка $I(A)$ ($\omega \sim 2.0$ кэВ, $\Delta\omega/\omega = 10^{-5}$, $|g_\tau| \approx 3.1 \cdot 10^{-4}$) дает значение $B \approx 1.3 \cdot 10^9$ $I(A)$ (фотон/с)/(мрад²) (на уровне 0.1 %).

Согласно оценкам [1, 9], эта яркость сравнима с яркостью излучения синхротрона второго поколения.

3. Установка для исследования КТПРИ

Результаты наших экспериментов по генерации КТПРИ нерелятивистскими электронами опубликованы в [12, 13].

Геометрия и схема экспериментов приведена на рис. 2. Для определенности показана геометрия Брэгга, но измерения также проводились и в геометрии Лауэ. Пучок электронов падает на поверхность тонкой кристаллической мишени вдоль оси Z . Угол θ_0 между осью Z и вектором обратной решетки мишени $\vec{\tau}$ устанавливается вращением мишени вокруг оси X . Угол наблюдения φ в нашем случае составляет примерно 90° относительно направления скорости электронов, что позволило уменьшить геометрический фактор, влияющий на ширину спектральной линии.

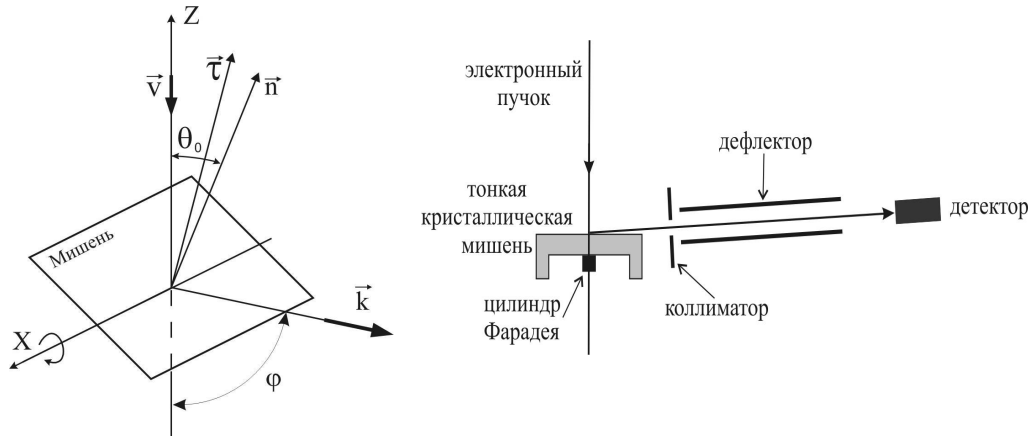


Рис. 2. Геометрия и схема эксперимента

Электронный пучок характеризуется следующими параметрами: энергия 50, 75, 100 кэВ; относительная нестабильность ускоряющего напряжения $2 \cdot 10^{-5}$. Дополнительно для снижения фона были установлены коллиматор и электростатический дефлектор электронов, находящийся под потенциалом ~ 5 кВ. Ток пучка измерялся цилиндром Фарадея, установленным за мишенью. Мишень фиксировалась на предметном столике, обеспечивающем линейные перемещения для

юстировки мишени относительно пучка и имеющем возможность ее вращения вокруг осей Z и X .

Для регистрации рентгеновских фотонов КТПРИ применялись два Si(Li) полупроводниковых детектора с площадями чувствительной поверхности 20 мм^2 , что обеспечивало угловую апертуру, равную 0.2 мрад. Один из детекторов оборудован бериллиевым окном толщиной 20 мкм и имел термоэлектрическое охлаждение, второй детектор с полимерным окном толщиной $0,5 \text{ мкм}$ и охлаждением жидким азотом предназначен для работы с мягким рентгеновским излучением от $\sim 500 \text{ эВ}$. Энергетическое разрешение обоих детекторов, определенное по характеристической линии кремния $K_\alpha \sim 1.73 \text{ кэВ}$, составляло $\sim 160 \text{ эВ}$. Спектры накапливались 4096-канальным анализатором ORTEC 2056-C, после чего переносились в компьютер, где подвергались первичной обработке и интерпретации.

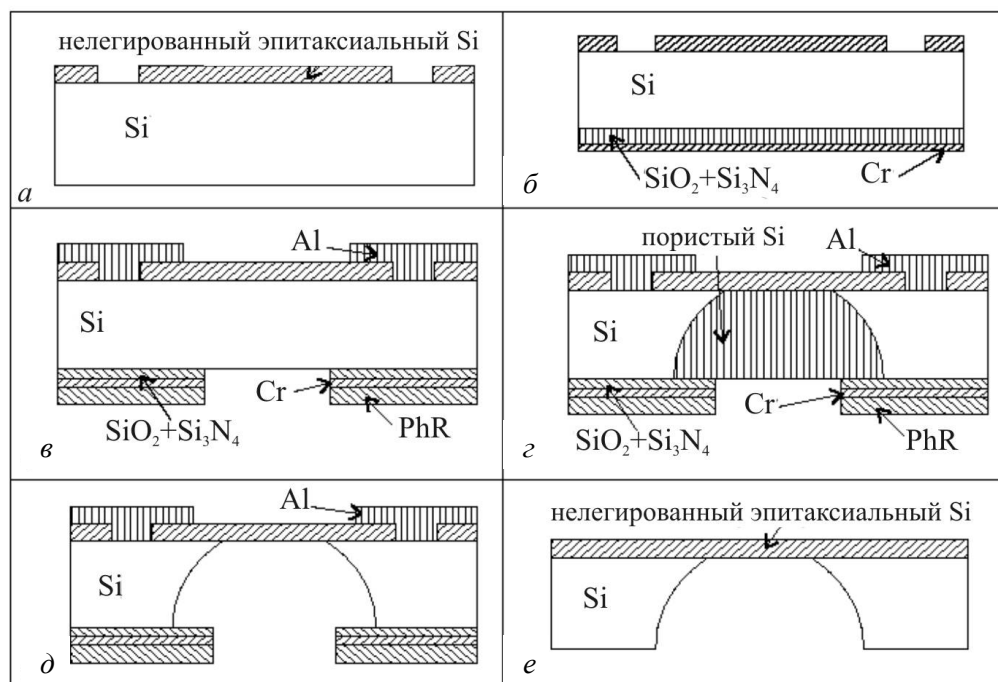


Рис. 3. Технологический маршрут изготовления кристаллических кремниевых мембран

Как уже упоминалось, необходимое условие для наблюдения КТПРИ при энергиях электронов 100 кэВ и менее – толщина кристаллической мишени $\leq 500 \text{ нм}$. Изготовление такой мишени в виде самоподдерживающейся мембраны потребовало создания специальной технологии. Рассмотрим кратко разработанный нами совместно с Минским НИИ радиоматериалов техпроцесс изготовления мишени и методику измерения ее толщины [14].

Мишень представляет собой кремниевый кристалл толщиной $\sim 200 \text{ мкм}$ размером $2 \times 2 \text{ мм}$, в котором изготавливается мембрана $\varnothing 1.0 \text{ мм}$ и толщиной $\sim 0.5 \text{ мкм}$. Материал мембраны – слой нелегированного эпитаксиального крем-

ния толщиной $\sim 0.9\text{--}1.0$ мкм, нанесенный на подложку высоколегированного p^+ -кремния марки КДБ 0.01<100> диаметром 100 мм и толщиной ~ 470 мкм. Выбор такой структуры определяется использованным методом электрохимического травления, при котором нелегированный эпитаксиальный Si служит в качестве стоп-слоя.

Для проведения процесса электрохимического травления необходимо изготовить электрический контакт с пластиной через слой высокоомного эпитаксиального Si с планарной стороны и утончить подложку до ~ 200 мкм. Подложка утончается механической полировкой.

Для получения контакта планарная сторона закрывается химически стойким лаком со вскрытием области по контуру подложки. Затем вся пластина травится в травителе для Si на толщину эпитаксиального слоя ~ 1 мкм (рис. 3, а). После снятия лака и химической обработки на непланарную сторону наносится SiO_2 толщиной $\sim 0.3\text{--}0.4$ мкм, Si_3N_4 толщиной $\sim 0.15\text{--}0.2$ мкм и напыляется Cr толщиной ~ 0.05 мкм для адгезии фоторезиста (рис. 3, б). Затем на непланарной стороне проводится фотолитография мембраны. Электрический контакт к пластине создается напылением пленки Al толщиной ~ 0.5 мкм при $T \sim 180^\circ\text{C}$ по контуру подложки через маску (рис. 3, в).

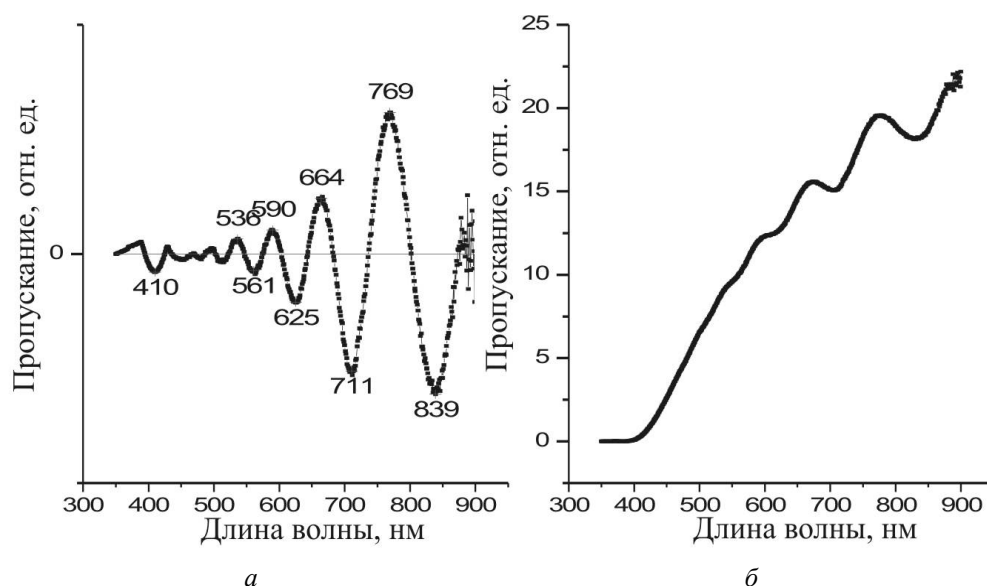


Рис. 4. Оптическое пропускание мембраны (а) и положения интерференционных максимумов (б)

Травление мембраны проводится в два этапа. На первом этапе выполняется электрохимическое пористое анодирование до эпитаксиального Si на глубину ~ 200 мкм в электролите $\text{HF}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}=4:1$ в течение ~ 120 мин при скорости ~ 1.8 мкм/мин. Контроль окончания процесса получения пористого Si производится по скачку потенциала $\sim 10\text{--}20\%$ при дотравливании до слоя высокоомного

эпитаксиального Si (рис. 3, з). После этого травление продолжается в течение дополнительного времени ~10 мин для выравнивания толщины пористого Si по всей поверхности подложки и утончения мембраны до ~0.5 мкм. Скорость травления высокоомного эпитаксиального Si незначительна и составляет ~50 нм/мин.

На втором этапе пористый Si травливается в растворе 1 % KOH в течение 30 мин (рис. 3, д). После травления пористого Si подложка извлекается из кассеты и производится снятие фоторезиста, Cr и Al в стандартных травителях. Диэлектрическая пленка SiO₂+Si₃N₄ снимается методом плазмохимического травления.

Разделение на кристаллы производится методом дисковой резки подложки, наклеенной с помощью нафталина на промежуточную кремниевую пластину. Готовые кристаллы с мембранами (рис. 3, е) получают при возгонке нафталина в термостате при $T \sim 110^\circ \text{C}$.

Толщина полученных мембран находится в диапазоне от 0.4 до 0.9 мкм, для получения более тонких мембран можно производить их утончение методом ионно-лучевого травления. Однако наш опыт показал, что ввиду их малой механической прочности, мишени в виде самоподдерживающихся мембран с толщинами менее 0.3 – 0.4 мкм получить крайне трудно.

Для оценки толщины мембран была разработана методика, основанная на измерении спектров оптического пропускания. Поскольку кремний толщиной порядка микрона и менее становится полупрозрачным в видимом свете, можно записать его спектр оптического пропускания (рис. 4, а). На спектре видны интерференционные максимумы, точное положение которых может быть получено после вычитания фоновой подложки (рис. 4, б). Комбинируя условия интерференции для соседних максимумов с учетом дисперсии кремния (~10 % в видимом диапазоне), можно получить следующее выражение для толщины плоско-параллельной пластинки:

$$d = \frac{\lambda_N \lambda_{N+1}}{2(n_{N+1} \lambda_N - n_N \lambda_{N+1})},$$

где n – коэффициент преломления; λ – длина волны в максимуме; индексы N и $N+1$ относятся к значениям величин, взятых в соседних максимумах.

Данные по измерениям толщины нескольких образцов, взятых произвольным образом, приведены в таблице. Можно видеть, что разброс толщины составляет величину менее 5 %. Разработанная технология получения тонких мембран также может использоваться при изготовлении различных мембранных датчиков давления, концентрации и расхода газов, а также других изделий микромеханики.

Результаты измерения толщины кристаллических мишеней-мембран

Номер образца	1	2	3	4	5
Толщина, нм	520±2	514±3	505±25	495±17	467±25

4. Результаты экспериментов с КТПРИ

Из (8) следует, что частота излучения в определенный рефлекс КТПРИ меняется при варьировании:

- угла наблюдения φ ;
- угла ориентации кристалла θ_0 ;
- скорости электронов v , то есть энергии электронного пучка.

Таким образом, изменяя какой-либо из этих трех параметров, можно выделить переменные характеристики в спектрах и обнаружить линии КТПРИ среди других (характеристических) линий, не имеющих ориентационной зависимости.

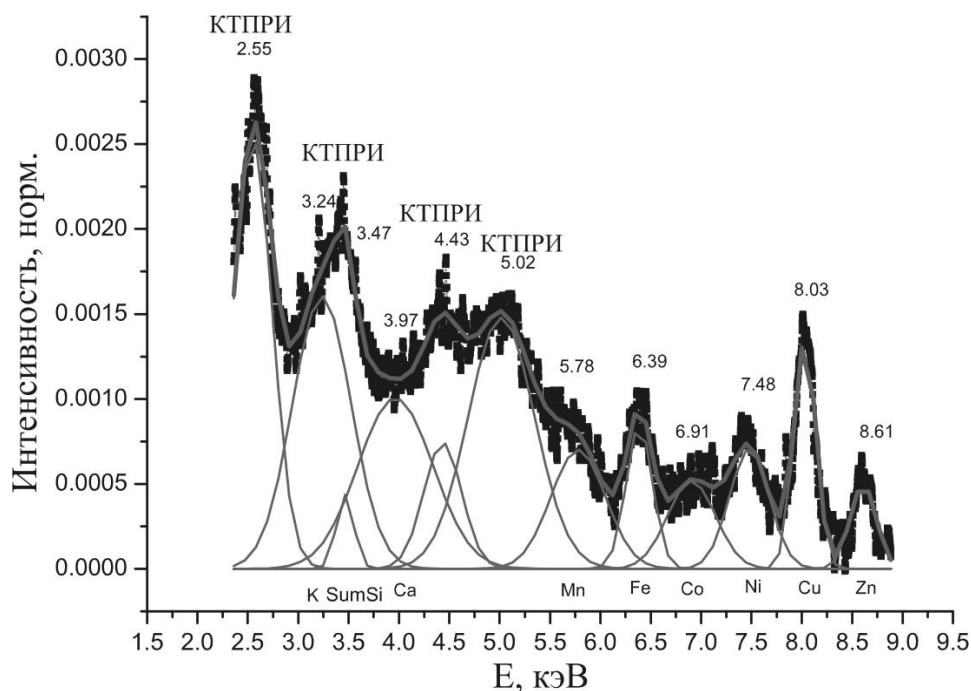


Рис. 5. Нормированный на максимум ХРИ кремния спектр излучения нерелятивистских электронов в тонкой кристаллической мишени с идентификацией пиков КТПРИ и характеристических линий

Эксперименты проводились нами в основном на мишенях с ориентацией базовой плоскости (111) и толщиной ~ 0.4 мкм. Измерения проводились при рабочих токах пучка от 40 до 150 нА. Выбор значения тока производился таким образом, чтобы скорость счета составляла величину порядка 3 кГц, что позволяло избежать искажений спектров из-за наложения импульсов. Характерное время накопления спектров составляло 5000 с. Усиление тракта регистрации было выбрано таким образом, чтобы детектировалось рентгеновское излучение в диапазоне <10 кэВ. Первичная обработка спектров была достаточно стандартной и

включала в себя калибровку по энергии, полиномиальное сглаживание не приводящей к уширению пиков процедурой Savitzky – Golay [15], вычитание фоновой подложки и аппроксимацию спектральных пиков гауссианами (рис. 5).

Далее количественные характеристики спектральных пиков использовались для их идентификации либо в качестве характеристических по таблицам [16], либо в качестве пиков КТПРИ по формуле (8). Ввиду того, что пики в спектрах в основном имеют малую интенсивность и, кроме того, часто перекрываются друг с другом, их аппроксимация (фитирование) происходит не всегда вполне корректно. Это приводит к достоверному определению характеристик только наиболее интенсивных или достаточно изолированных пиков. Характеристические линии, регистрируемые в спектрах, имеют двоякое происхождение: часть линий порождаются рентгеновской флуоресценцией конструкционных материалов колонны микроскопа и других внутренних элементов конструкции (в основном нержавеющая сталь и латунь), возбуждаемых рассеянными мишенью электронами пучка; другие пики – это характеристические линии материала мишени, а также примесей и загрязнений на ней. Укажем еще на присутствие в некоторых спектрах суммарного характеристического пика кремния ($\text{SumSi} \approx 3.46 \text{ кэВ}$), возникающего из-за случайного наложения импульсов в силу его интенсивности, большей на два порядка, чем интенсивности остальных линий в спектре.

На рисунках 6, 7 приведены фрагменты нормированных спектров КТПРИ, обработка которых показала, что частота пиков излучения зависит от энергии пучка в полном соответствии с формулой (8). В согласии с теорией меняется частота КТПРИ при вращении мишени вокруг оси X , то есть при изменении угла падения θ_0 (рис. 8) и изменении угла наблюдения φ (рис. 9). Сдвиги частоты КТПРИ составляют 100–350 эВ в зависимости от индекса пика. Нами также были получены линии мягкого рентгеновского излучения, перестраиваемые в диапазоне 850–950 эВ при варьировании угла падения (рис. 8, б).

Спектральные линии КТПРИ были соотнесены нами с соответствующими системами кристаллографических плоскостей. В реализованной геометрии генерации излучения отражения от кристаллографических плоскостей с одинаковой суммой индексов Миллера ($S = h+k+l$) имеют близкие частоты. Конечно же речь идет об отражениях, разрешенных симметрией решетки кремния, в частности, рефлекс с ($S = 6$) запрещен.

Таким образом, пики КТПРИ должны иметь тонкую структуру, расщепление в которой согласно расчетам должно увеличиваться с увеличением угла падения пучка на мишень. Например, при угле падения, равном 3° , расщепление должно быть порядка 0.2 кэВ, а при наклоне мишени в 10° оно уже может достигать значения 0.7 кэВ. На гармониках с $S = 7$ и 8 в спектрах такое расщепление уже вполне отчетливо видно (см. рис. 10, там же приведена моделированная кривая). Расщепление на гармониках с $S = 4$ и 5 плохо заметно ввиду недостаточного спектрального разрешения детектора.

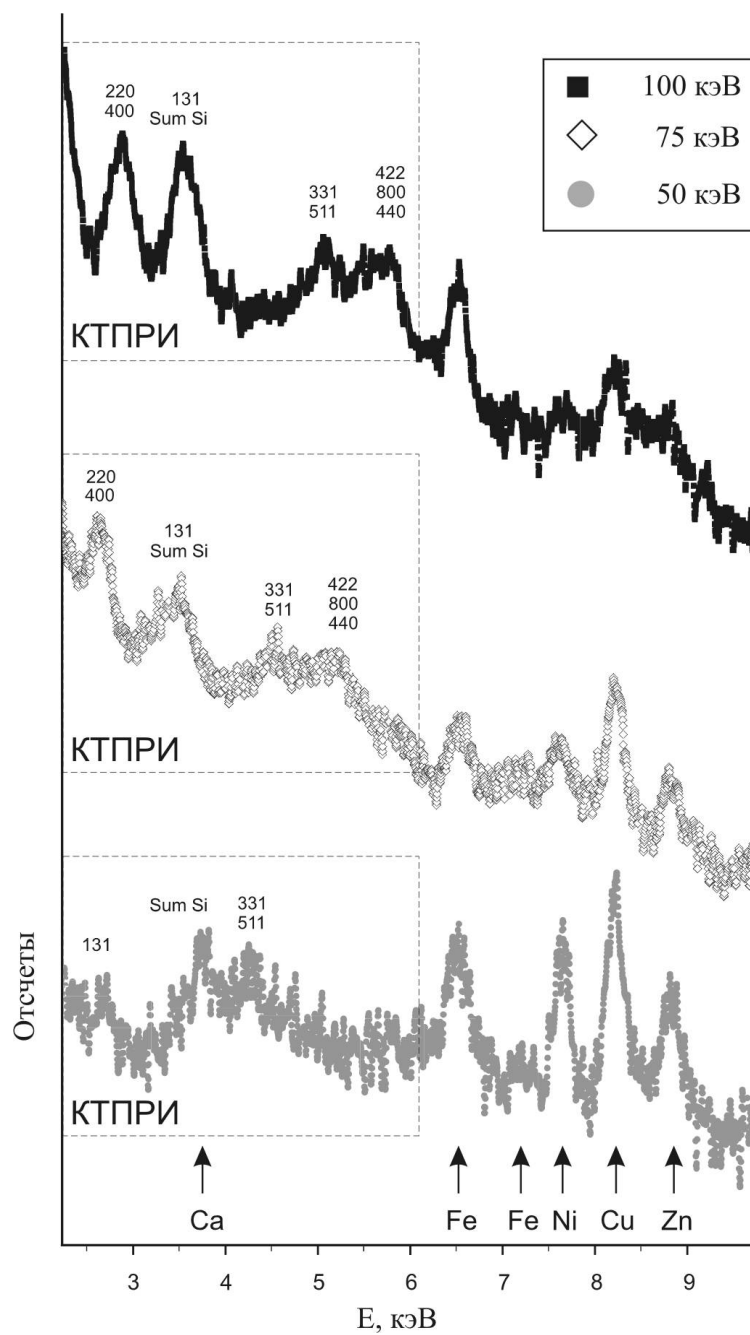


Рис. 6. Изменение частоты КТПРИ в геометрии Брэгга при варьировании энергии пучка электронов

Спектры моделировались на основе формулы из [1], описывающей спектрально-угловую плотность излучения (система единиц $\hbar = c = 1$):

$$\frac{\partial^2 N_{n\omega}}{\partial \omega \partial \vec{n}} = \frac{4e^2}{3\pi} Z^2 \left(\frac{e^2}{m} \right)^2 \rho L \ln \left[\frac{137}{Z^{1/3}} \right] \frac{1}{\omega} +$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi^2} \omega 2\pi \frac{L_a}{v} (1 - \exp\{-L/L_a\}) \sum_g \left| \vec{v} \vec{E}_g - \frac{e}{m} \frac{U_g}{(\vec{g}\vec{v})\Omega} \left[\vec{e}_s \vec{g} + (\vec{e}_s \vec{v}) \frac{(\vec{k}\vec{g})}{(\vec{g}\vec{v})} \right] \right|^2 \delta(\omega - \vec{k}_g \vec{v}),$$

где $\vec{E}_g = \frac{\chi_g}{k_g^2 - \omega^2} \left[\vec{k}_g (\vec{g}\vec{e}_s) - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{e}_s \right]$, $\vec{k}_g = \vec{n}_k \omega + \vec{g}$, $\vec{k} = \vec{n}_k \omega$, U_g – фурье-компонента кристаллического потенциала. Первый член этого выражения описывает тормозное излучение, а второй – КТПРИ.

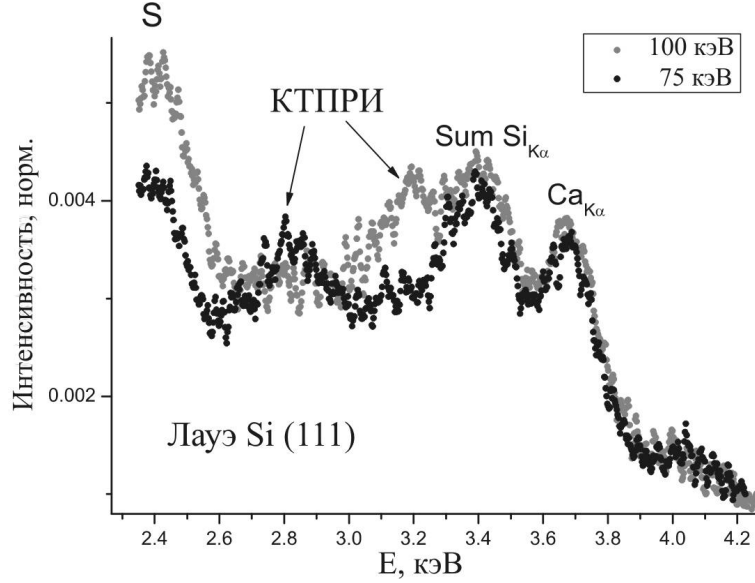


Рис. 7. Изменение частоты КТПРИ в геометрии Лауэ при варьировании энергии пучка электронов

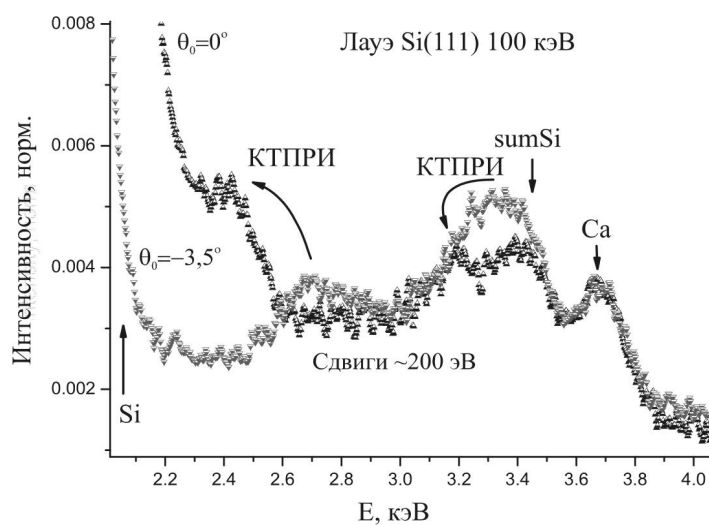
Количество рентгеновских фотонов, зарегистрированных детектором, теперь может быть рассчитано как

$$dN_{n\omega} = \int \frac{\partial^2 N_{n\omega}}{\partial \omega \partial \vec{n}} \exp \left\{ - \left(\frac{\theta - \theta_d}{\Delta \theta_d} \right)^2 - \left(\frac{\omega - \omega_d}{\Delta \omega} \right)^2 - \left(\frac{\phi - \phi_d}{\Delta \phi} \right)^2 \right\},$$

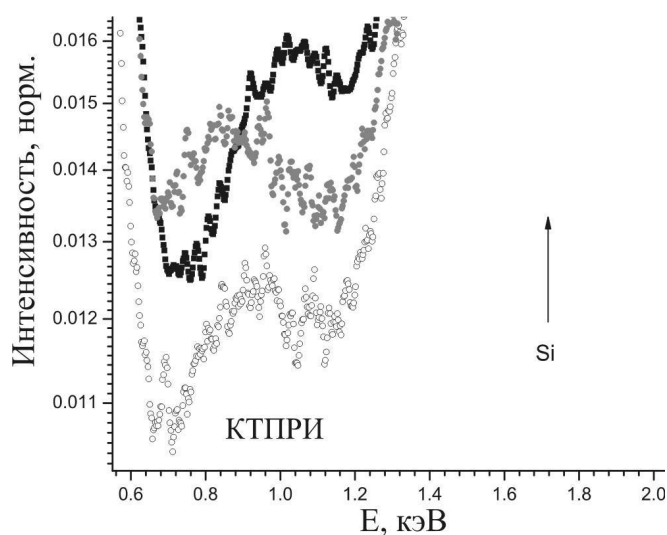
где $\Delta \theta_d$ и $\Delta \omega$ обозначают угловую апертуру и спектральное разрешение детектора, а $\Delta \phi$ соответствует уширению линии, обусловленному разбросом параметров пучка.

В итоге расчетов пик с энергией в диапазоне 2.5–2.9 кэВ (рис. 11) был отнесен к рефлексам (220) и (400) со всеми перестановками индексов; рефлекс (131) с перестановками накладывается при энергиях 100 и 75 кэВ на суммарный пик

характеристического излучения кремния, но виден при 50 кэВ в районе 2.6 кэВ; диапазон энергий 4.9–5.2 кэВ относится к рефлексам (331) и (511) с перестановками; наконец, энергии 5.4–6.0 кэВ соответствуют рефлексам (440), (422) и (800) с перестановками индексов.



a



б

Рис. 8. Сдвиги линий КТПРИ в зависимости от угла падения пучка на мишень:
a – изменение частоты КТПРИ при наклоне мишени; *б* – тоже для мягкой линии
 КТПРИ $\omega \leq 1$ кэВ

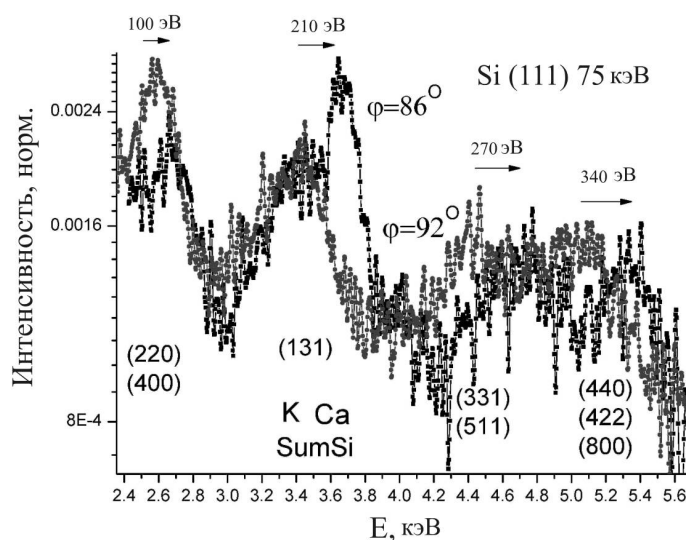


Рис. 9. Сдвиги линий КТПРИ в зависимости от угла наблюдения

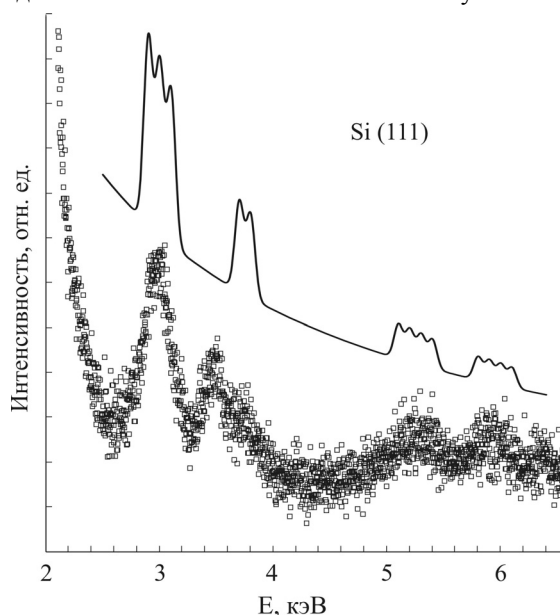


Рис. 10. Экспериментальный и моделированный спектры КТПРИ, энергия пучка 100 кэВ

Оценка интегрального выхода излучения дает значение $\sim 10^{-8}$ фотон/ $e^- \cdot \text{ср}$, что близко к расчетному значению интенсивности. Нормированная зависимость интенсивности КТПРИ от энергии электронов была построена для трех гармоник и трех значений энергии пучка (рис. 12). Нормировка производилась по характеристическому рентгеновскому излучению (ХРИ) кремния с учетом зависимости выхода ХРИ от энергии пучка. Согласно [17], интенсивность К-линий

рентгеновского спектра может быть рассчитана по следующему практическому выражению:

$$I_K = \frac{ai(y-1)^{1,65}}{r^2(1+by^{1,65}/\sin \alpha)},$$

где $a = 4 \cdot 10^{-5} Z^5 / (Z^4 + 10^6)$; i – ток электронов, мА; $y = U/U_K$ – отношение ускоряющего потенциала к потенциалу ионизации; $b = 3 \cdot 10^{-6} \mu_m U_K^{1,65}$; μ_m – массовый коэффициент поглощения для К-линий, см²/г; α – угол выхода излучения, измеренный от поверхности мишени.

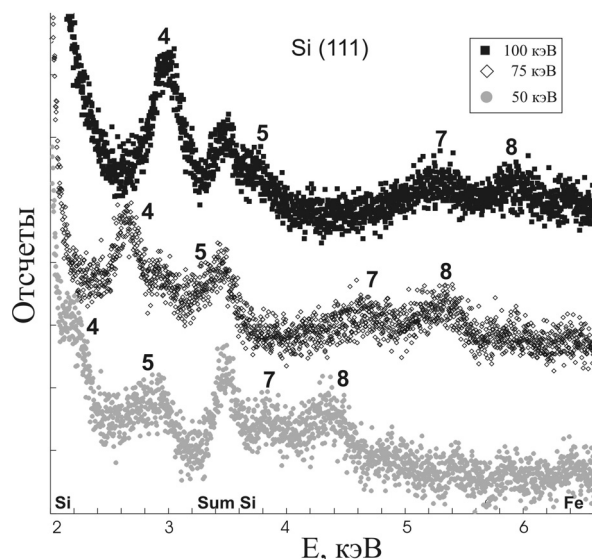


Рис. 11. Индексация пиков КТПРИ, полученных в геометрии Лауэ при различных энергиях пучка

Расчеты показали, что если принять интенсивность ХРИ кремния при энергии пучка 50 кэВ I_{50}^{Si} за единицу, то $I_{75}^{Si}/I_{50}^{Si} = 1.08$ и $I_{100}^{Si}/I_{50}^{Si} = 1.11$. Для приведения к одинаковому току измеренные величины интенсивностей ХРИ были скорректированы на указанные отношения. Поскольку измеренные величины интегральных интенсивностей ХРИ $I_{75}^{Si}/I_{50}^{Si} = 1.04$ и $I_{100}^{Si}/I_{50}^{Si} = 1.08$, т. е. близки к расчетным, можно сделать вывод, что ток практически полностью проходит через мишень, а его установка и измерение являются вполне надежными и воспроизводимыми.

К сожалению, подгонку пиков КТПРИ и определение их параметров из-за их относительно низкой интенсивности и наложений на линии ХРИ, присутствующие в спектре, удалось сделать не для всех гармоник, поэтому из полученных данных пока нельзя вывести функциональную зависимость интенсивности излучения от энергии электронов и подтвердить квадратичную зависимость согласно формуле (7).

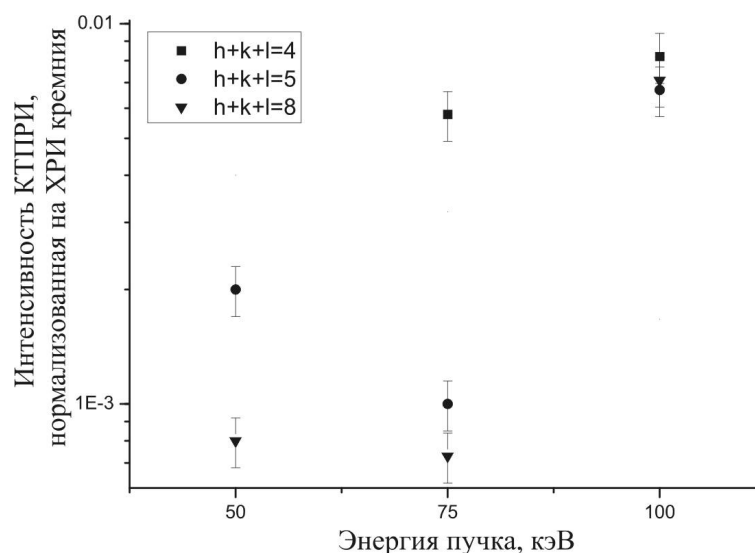


Рис. 12. Зависимость интенсивности КТПРИ, нормированной по ХРИ кремния, от энергии электронов для пиков с индексами Миллера (hkl)

В целом проведенный анализ подтверждает, что нами зарегистрированы спектральные линии КТПРИ, частота и интенсивность которых, а также зависимости частот от энергии пучка, углов ориентации мишени и угла наблюдения излучения хорошо согласуются с расчетами, выполненными по теории [1].

Результаты, рассмотренные в настоящей статье, получены при финансовой поддержке работы Международным научно-техническим центром в рамках проекта № В626.

Литература

1. Feranchuk I. D. et al. // Phys. Rev. E. 2000. Vol. 62. P. 4225.
2. Коробочко Ю. С., Космач В. Ф., Минеев В. И. // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. С. 1248.
3. Vecchio K. S., Williams D. B. // Journ. Microscopy. 1987. Vol. 147. P. 15.
4. Reese G. M., Spence J. C.H., Yamamoto N. // Philos. Mag. 1984. Vol. 49. P. 697.
5. Spence J. C. H., Reese G. M. // Acta. Cryst. A. 1986. Vol. 42. P. 577.
6. Feranchuk I. D., Ulyanekov A. // Acta. Cryst. 2001. Vol. A57. P. 283.
7. Feranchuk I. D., Ulyanekov A. // Acta. Cryst. 1999. Vol. A55. P. 466.
8. Baryshevsky V., Feranchuk I., Ulyanekov A. Parametric X-ray Radiation in Crystals: Theory, Experiment and Applications. 2006.
9. Feranchuk I. D., Batrakov K. G. // NIM. 2005. Vol. 543. P. 55.
10. Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D. // NIM. 1985. Vol. 228. P. 490.
11. Freudenberger J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 2487.
12. Барышевский В. Г. и др. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. С. 50.
13. Baryshevsky V. G. et al. // Phys. Lett. A. 2007. Vol. 363. P. 448.
14. Vyssotsky V. B., Lobko E. V., Lobko A. S. // LANL e-Print archive. 2005. 0508079.
15. Savitzky – Golay Smoothing Filters. <http://www.library.cornell.edu/nr/bookcpdf/c14-8.pdf>.
16. Блохин М. А., Швейцер И. Г. Рентгеноспектральный справочник. 1982.
17. Иванов С. А., Щукин Г. А. Рентгеновские трубки технического назначения. 1989.

COHERENT BREMSSTRAHLUNG AND PARAMETRIC X-RAYS (CB&PXR) FROM NON-RELATIVISTIC ELECTRONS

**V. G. Baryshevsky, K. G. Bartrakov, A. O. Grubich, A. A. Gurinovich,
A. S. Lobko, A. A. Rouba, P. F. Safronov, V. I. Stolyarsky,
B. A. Tarnopolsky, A. P. Ulyanenko*, I. D. Feranchuk****

Experimental observation of x-ray radiation from non-relativistic (50–100 keV) electrons of the electron microscope beam in thin crystal target is reported and described as resulted from interference between parametric x-rays (PXR) and coherent *Bremsstrahlung* (CB). CB&PXR features are qualitatively described on the base of the pseudo-photon concept. Rigid requirements for thin single crystal membranes are obtained. The experimental set-up, thin silicon crystal target production, measurement procedures, data processing and spectra simulation are reported in detail. Each CB&PXR spectral line is attributed to a set of crystallographic planes.

Possibility of tuning of the x-ray frequency by the crystal target rotation is demonstrated for low-energy electrons for the first time. Despite its rather low total quantum yield of CB&PXR for the electrons in the considered energy range, this radiation can be prospective for development of a tabletop tunable x-ray source for structure analysis and crystallography (for example, for spectral-sensitive experiments) due to its brightness in the narrow spectral interval. Production of single crystal membranes is expected to become a high-tech challenge, when developing such a source.

Reported results are obtained due to support of the ISTC in the framework of the Project #B626.

* Bruker AXS, Germany.

** Department of Physics, Belarusian State University.

ПОДВОДНЫЙ СПЕКТРОМЕТР ДЛЯ СИСТЕМЫ МОНИТОРИРОВАНИЯ НЕЙТРИННОГО ТЕЛЕСКОПА КМЗNeT

**G. Etiope*, С. И. Агафонов, А. О. Грубич, А. С. Лобко,
А. И. Лаптев**, А. Р. Лопатик, С. А. Кутень, А. А. Хрушинский**

Нейтринный телескоп КМЗNeT (cubic kilometer Neutrino Telescope), строящийся пан-европейским консорциумом и находящийся в настоящее время в стадии дизайн-проекта, будет одним из самых больших из когда-либо построенных детекторов частиц и астрономических инструментов (<http://www.km3net.org>). Идея построения телескопа состоит в расположении трехмерной конструкции из нескольких тысяч ФЭУ, просматривающих примерно кубический километр морской воды Средиземного моря на глубине порядка трех-четырех километров. Чистота воды вблизи дна моря обеспечивает длину поглощения черенковского света, возбуждаемого мюонами, которые порождаются нейтрино, проходящими через толщу Земли, равной 40–50 м. Временные и пространственные сигналы с фотодетекторов позволят выполнить реконструкцию траекторий мюонов, а следовательно, и нейтрино. ФЭУ будут помещены в специальные прозрачные корпуса, выдерживающие давление до 600 атмосфер, и связаны усиленными подводными стекловолоконными кабелями для передачи данных с детектора на наземную станцию, находящуюся в сотне километров от телескопа.

Инфраструктура КМЗNeT также будет служить платформой для размещения детекторов и сбора данных для мониторинга состояния подводной среды, окружающей нейтринный телескоп. Мониторинг включает измерения чистоты воды, скорости подводных течений, биолюминесценции, вариаций природной и техногенной радиоактивности морской воды, подводной сейсмометрии и других параметров, данные которых позволят учитывать динамику фоновых характеристик детекторной системы. Предполагается также использование данных мониторинга КМЗNeT для исследований в области океанологии, морской биологии, геологии и геофизики.

Одним из основных источников фонового светового излучения, регистрируемого ФЭУ телескопа, будет черенковское излучение, испускаемое морской водой под воздействием электронов радиоактивного распада естественного радионуклида ^{40}K (максимальная энергия спектра бета-излучения 1.37 МэВ). Удельная активность ^{40}K в морской воде составляет около 12 Бк/дм³ и определяет ее естественную радиоактивность в толще морской воды (в поверхностном слое воды вблизи суши присутствует ^{222}Rn и его дочерние продукты распада; в придонном слое воды весь спектр естественных нуклидов радиоактивных семейств ^{238}U и ^{232}Th). Как следствие, мониторинг ^{40}K в морской воде является одной из многочисленных инженерных задач, решаемых при создании телескопа КМЗNeT.

НИИ ЯП БГУ был приглашен Национальным Институтом геофизики и вулканологии Италии (INGV, г. Рим) разработать прототип подводного гамма-спектрометра для мониторинга в морской воде удельной активности ^{40}K (гамма-

* Национальный институт геофизики и вулканологии (Рим, Италия).

** ЗАО «ТИМЕТ» (г. Минск).

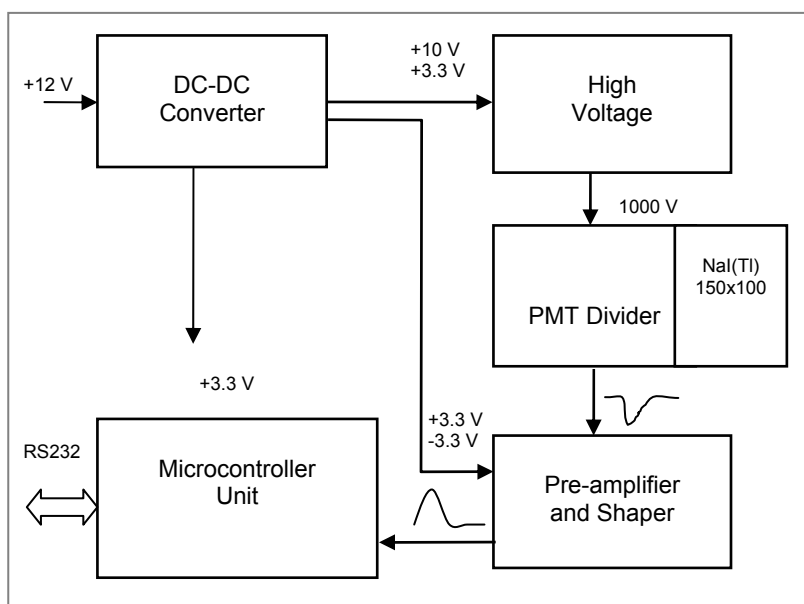


Рис. 1. Структурная схема спектрометра

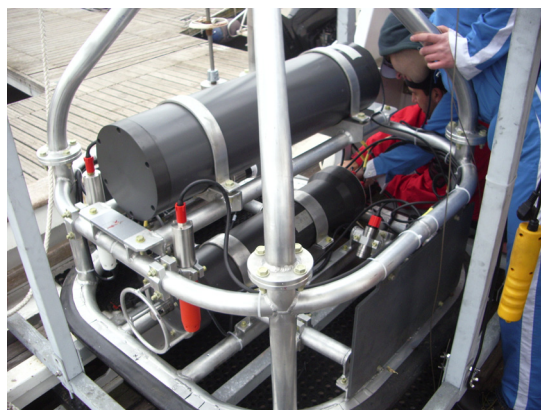


Рис. 2. Спектрометр, размещенный в составе глубоководной исследовательской станции MEDUSA

линия с энергией 1.461 МэВ), а также изотопов семейств ^{238}U и ^{232}Th , испускающих гамма-излучение. Работа выполнялась в содружестве с компанией Tech-pomare SpA (г. Венеция), ответственной в этом проекте за адаптацию оборудования к условиям глубоководной эксплуатации.

Структура созданного прототипа спектрометра приведена на рис. 1.

Для детектирования гамма-излучения в диапазоне энергий до 3 МэВ использован кристалл NaI(Tl) диаметром 150 мм и длиной 100 мм. Водонепроницаемая оболочка из сплава алюминия цилиндрической формы, рассчитанная на

глубину погружения до 3000 м, разработана компанией Technomare SpA. Общий вид спектрометра, помещенного в водонепроницаемую оболочку, изображен на рис. 2.

На рисунке 3 изображена расчетная зависимость эффективности спектрометра в водонепроницаемой оболочке в водной среде в зависимости от энергии гамма-излучения, полученная методом моделирования Монте-Карло.

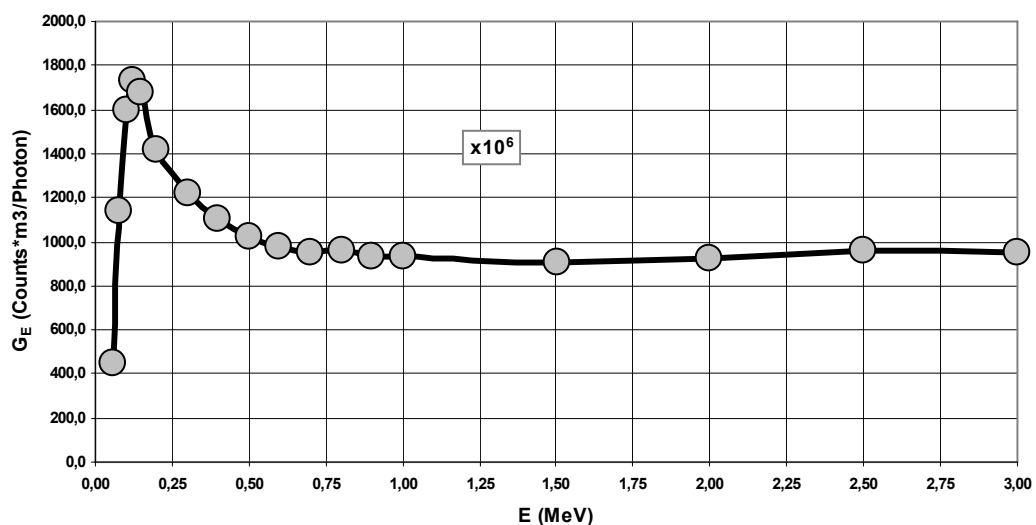


Рис. 3. Расчетная зависимость эффективности спектрометра в водонепроницаемой оболочке в водной среде в зависимости от энергии гамма-излучения

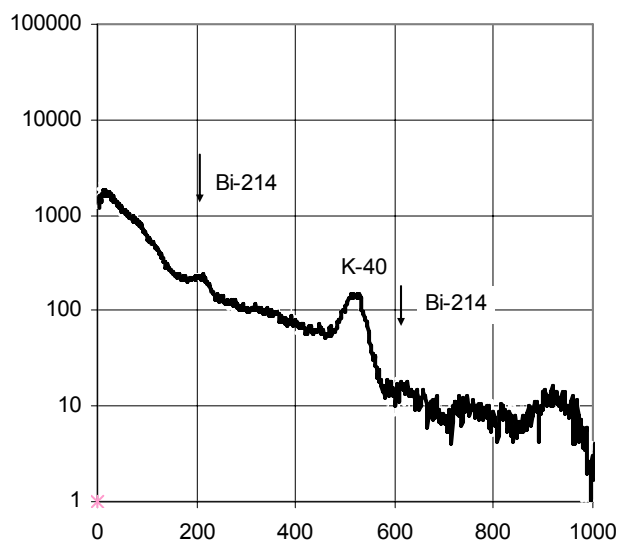


Рис. 4. Экспериментальный спектр на испытаниях спектрометра в северной части Адриатического моря



Рис. 5. Извлечение спектрометра после глубоководной долговременной миссии

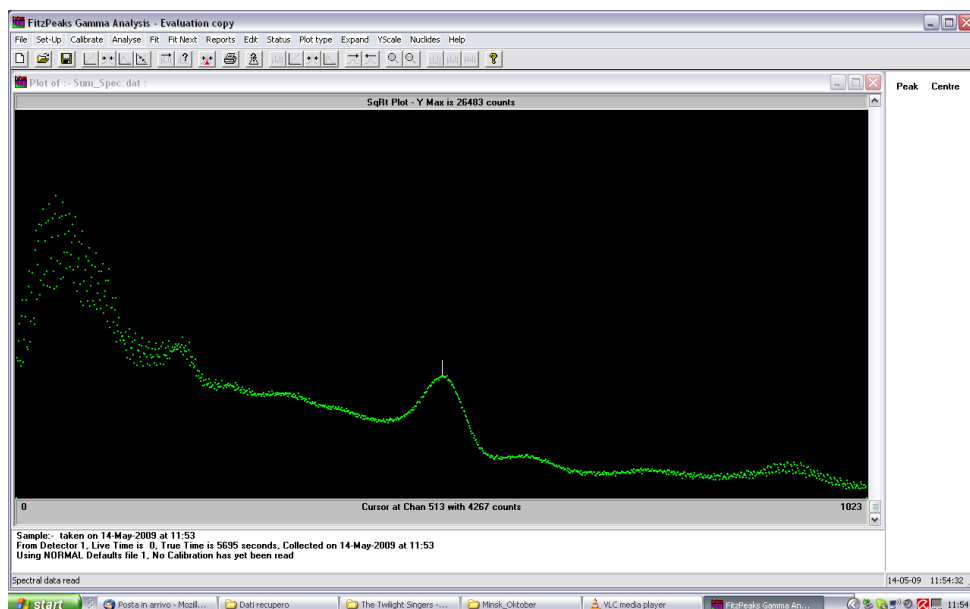


Рис. 6. Образец гамма-спектра естественной радиоактивности средиземноморской воды на большой глубине в районе Сицилии

Обработка спектра, приведенного на рис. 4, специальной программой анализа спектров, разработанной для обеспечения работы подводного спектрометра, дает следующие значения для удельных активностей, Бк/дм³:

- 9.8 – ⁴⁰K;
- 1.4 – ²²²Rn;
- 0.21 – ²³²Th.

В ходе выполнения морских испытаний на глубине погружения спектрометра была отобрана проба воды. Результат лабораторного анализа пробы морской воды (БелГИМ, протокол № 217 от 31.03.2008), Бк/кг:

- 10.6 ± 4.3 – ^{40}K (гамма-спектрометрия);
- 0.65 ± 0.25 – ^{232}Th (гамма-спектрометрия).

Приведенные результаты подтверждают работоспособность созданного подводного спектрометра. Однако для выяснения его эксплуатационных характеристик при регистрации изотопов рядов ^{238}U и ^{232}Th требуются дополнительные натурные и лабораторные исследования.

В период с 4 ноября 2008 г. по 11 мая 2009 г. гамма-спектрометр находился на глубоководных измерениях в Средиземном море (рис. 5). За время работы в памяти спектрометра был накоплен 751 спектр. Это означает, что он отработал весь срок без сбоев и пропусков данных. Образец гамма-спектра при глубоководном расположении спектрометра показан на рис. 6. Детальный анализ полученных данных будет опубликован позже.

UNDERWATER SPECTROMETER FOR MONITORING SYSTEM OF KM3NET NEUTRINO TELESCOPE

G. Etiope*, S. I. Agafonov, A. A. Grubich, A. S. Lobko, A. I. Laptev,
A. R. Lopatik, S. A. Kuten, A. A. Khruschinsky**

Underwater scintillation gamma-spectrometer to monitor activity of K-40 and some other nuclides in seawater was developed in the INP on the request of National Institute for Geophysics and Vulcanology (Italy) and tested in laboratory and real sea conditions. The spectrometer is intended to monitor natural radio-activity background near the sea-bed at the site of KM3Net neutrino telescope deployment in the Mediterranean. Comparison of the K-40 spectrometer measurement results aquired in the Adriatic Sea with independent laboratory (Belarus State Institute for Metrology) measurement results of the water samples taken during the spectrometer immersion shows very good agreement.

* Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia (Rome, Italy).

** Company "TIMET", Minsk.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ В НАНОСТРУКТУРАХ

**С. А. Максименко, Г. Я. Слепян, К. Г. Батраков, П. П. Кужир,
А. В. Мадьяров, А. М. Немиленцев, А. А. Хрущинский, М. В. Шуба**

1. Введение

Последние два десятилетия развития науки и технологии ознаменовались быстрым прогрессом в синтезе различных типов искусственных сред и материалов, обладающих наноразмерной структурированностью и свойствами, существенно отличающимися от свойств природных сред. По сути дела, происходит фундаментальный перелом в физике и химии конденсированного состояния, значительно расширяющий наши представления о природе твердых тел и наши возможности управления их свойствами, сделан решительный шаг к созданию материалов, приборов и устройств с новыми уникальными свойствами. Слово-сочетания с приставкой нано-: наноэлектроника и нанооптика, наномеханика, наносенсорика, наноматериалы – определяют целые направления в современной физике, химии, материаловедении, приборостроении.

Развитие наноэлектроники – электроники на глубоком субмикронном уровне, т. е. с линейными размерами элементов цепей меньше 0.1 мкм, – создает предпосылки нового шага в решении проблемы миниатюризации устройств передачи, приема и обработки информации. Термин охватывает как традиционные микроэлектронные устройства и технологии с более высокой степенью миниатюризации, так и последние достижения молекулярной электроники, которая манипулирует одиночными атомами и молекулами. Идет разработка мономолекулярных логических схем, которые могут стать основой для новых поколений компьютеров, отличающихся сверхминиатюрными размерами при уникальной эффективности. Основу для этого создают новые нанотехнологические материалы, такие как фуллерены [1] и углеродные нанотрубки (УНТ) [1, 2] – квазиодномерные макромолекулы углерода, органические полимеры [3], структуры на основе квантовых ям, квантовых проводов и квантовых точек (КТ) – локализованных наноразмерных включений в полупроводник [4–6], обеспечивающих пространственное квантование движения носителей заряда в одном или нескольких направлениях и тем самым возможность использования таких структур в качестве активных сред полупроводниковых лазеров. Широкий обзор работ по лазерам на КТ представлен в монографии [6]. Недавние исследования продемонстрировали возникновение гибридных форм углерода – пиподов – на основе внедрения в УНТ различных фуллеренов [7], таких как C_{60} , C_{70} , C_{80} , C_{84} и металлофуллеренов [8], например $Gd@C_{82}$ и $Sc_2@C_{84}$. Оптические и электронные свойства КТ привлекают внимание также многообещающими возможностями для хранения, передачи и обработки квантовой информации [8–12]. В частности,

достигнут значительный прогресс в создании однофотонных источников света [12, 13].

Твердотельные наноструктуры представляют собой наноразмерные неоднородности различной природы и конфигурации внутри полупроводниковых и диэлектрических сред. Несмотря на различную физическую природу этих объектов, их объединяют весьма малые размеры в одном или нескольких направлениях, всего на 1–2 порядка превышающие характерное межатомное расстояние. При этих условиях длина волны де Бройля электрона оказывается сравнимой с размерами системы, и квантовая природа носителей заряда проявляется в полной мере. В частности, *пространственное ограничение движения зарядов* приводит к дискретизации энергетического спектра с энергетическими уровнями, определяемыми размером и формой нанообъекта. Именно этот эффект лежит в основе использования полупроводниковых структур пониженной размерности в качестве активной среды полупроводникового лазера, обеспечивает уникальное свойство одностенных УНТ менять свою проводимость на несколько порядков, от полупроводниковой до металлической, при изменении радиуса на несколько ангстрем.

Помимо эффекта пространственного ограничения движения носителей заряда, присущая наноструктурам пространственная неоднородность создает в них *наномасштабные неоднородности электромагнитных полей*. Во многих случаях они порождают значительную пространственную дисперсию, которая, как известно, играет фундаментальную роль и в классической кристаллооптике [14]. Если первый фактор лежит в фокусе современных физических исследований наноструктур, то роль второго из них часто недооценивается. Осознание этого факта явилось мотивацией для цикла исследований по электродинамике наноструктур, выполненных в лаборатории электродинамики неоднородных сред НИИ ядерных проблем БГУ.

Развитие электродинамики всегда тесно увязывалось с практическими проблемами, возникающими при решении задачи приема-передачи и обработки сигналов теми или иными системами в тех или иных средах. Так, например, проблема радиолокации привела к развитию методов решения задач рассеяния электромагнитных волн на телах произвольной формы [15], а потребность осуществления дальней радиосвязи привела к созданию теории рассеяния на статистически неоднородных поверхностях [16]. Становление квантовой электроники потребовало создания теории открытых квазиоптических резонаторов [17]. Синтез высококачественных оптических волокон сделал реальной волоконно-оптическую связь, что привело к развитию теории открытых диэлектрических волноводов [18, 19]. Развитие микроэлектроники стимулировало работы по электродинамике микрополосковых и других планарных структур [20]. Современный этап развития электродинамики связан с созданием высокоэффективных методов описания дифракции на телах с произвольной пространственной конфигурацией и диссипацией энергии [21]. Учитывая прогресс технологий синтеза все новых типов наноструктурированных объектов и материалов и потребности их применения в информационных и сенсорных системах, можно с уверенностью утверждать, что *моделирование наноструктур и наноразмер-*

ных элементов цепей и систем является одним из магистральных направлений развития современной электродинамики. В связи с этим возникают новые постановки задач, а хорошо известные приемы и методы наполняются новым содержанием.

Первый этап развития квантовой физики твердого тела был полностью посвящен однородным средам. Итогом моделирования среды было дисперсионное уравнение для связанных состояний электромагнитного поля и материальных частиц. Его решения соответствуют собственным волнам среды так называемым квазичастицам, которые отличаются от обычных (свободных) частиц сложным видом дисперсионной характеристики. Переход к наноразмерным неоднородностям создал условия для дифракции и рассеяния квазичастиц, их преобразования друг в друга, подобно тому, как это имеет место для электромагнитных волн в нерегулярных волноводах или в квантовых полупроводниковых сверхрешетках [22]. Существенную роль при этом играют резонансные взаимодействия различных мод. Процессы взаимодействия различных мод в наноструктурах оказываются более сложными ввиду большего разнообразия взаимодействующих мод и сложной трехмерной конфигурации неоднородностей. Соответственно электромагнитные свойства наноматериалов также оказываются более богатыми и разнообразными. В частности, квантование движения носителей заряда и неоднородность электромагнитного поля внутри и вблизи наноразмерных объектов часто приводит к пространственной нелокальности электромагнитного отклика, обеспечивает необычные механизмы неустойчивости и нелинейности, делает нанобъекты привлекательными для использования в квантовых информационных сетях для хранения и передачи квантовой информации.

Таким образом, особенностью электродинамики наноструктур является то, что, в отличие от классической электродинамики, она имеет дело с системами и средами со сложными и необычными законами дисперсии квазичастиц. По сути дела, электродинамическая задача на наноуровне должна формулироваться как самосогласованная задача о движении носителей заряда в создаваемом ими электромагнитном поле. Очевидно, что в этом случае традиционное для классической электродинамики введение материальных параметров среды становится невозможным или, по крайней мере, требует существенной модификации.

Во многих случаях при взаимодействии наноструктур со светом принципиальную роль играет квантование последнего. При этом мы приходим к необходимости развития *квантовой оптики наноструктур и наноструктурных композитов*. Здесь следует подчеркнуть, что применение к наноструктурам общих принципов квантования электромагнитного поля [23] не является тривиальным. Особо следует выделить проблему введения эффективных материальных уравнений экситонного композита. Здесь известны различные способы, причем не всегда они принципиально эквивалентны. Между тем проблема особенно существенна именно в квантовой оптике: нарушение некоторых общих условий для материальных уравнений сразу же приводит к физическим противоречиям при квантовании поля [23]. Наиболее оправданный и эффективный путь здесь, по нашему мнению, основан на введении показателя преломления через амплитуду

рассеяния одиночного рассеивателя на нулевой угол. Следует подчеркнуть, что этот путь применим не только для фотонов, но и для квантовых частиц иной физической природы (атомов, атомных ядер, нуклонов и т. д.), что позволило положить его в основу ядерной оптики поляризованных сред [24].

Начало работ в лаборатории в данном направлении можно отнести к 1997 г. К настоящему моменту заложены основы новой исследовательской дисциплины – наноэлектромагнетизма, синтезирующей макроскопическую электродинамику и микроскопическую теорию электронных свойств низкоразмерных структур. Исследования охватывают широкий класс эффектов переноса и линейной электродинамики УНТ и композитов на их основе [25–38], нелинейного переноса и нелинейной оптики УНТ [39–45], электродинамики КТ и их массивов с учетом влияния локальных полей [46–59], квантовой электродинамики низкоразмерных структур [60–65]. Начаты теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия СВЧ излучения с нанокомпозитами на основе луковичных форм углерода (ЛФУ) [66, 66]. Обосновывается единый подход к построению электродинамики наноструктур [64], который аккумулирует и использует хорошо известные методы и приемы макроскопической электродинамики [21]. В работе [64] впервые вводится понятие наноэлектромагнетизма как самостоятельного направления исследований.

Исследования выполнялись в рамках ряда проектов Государственных программ фундаментальных исследований: «Электроника», «Вещество» «Нанотех», «Фотоника», Межвузовских программ фундаментальных исследований «Наноэлектроника» и «Низкоразмерные системы» и при поддержке БРФФИ (проекты Ф97-174, Ф99-069, Ф01-047, Ф01-176, Ф02Р-047, Ф04М-078, Ф05-127, Ф06Р-091, Ф06Р-101). Существенная поддержка исследованиям оказана со стороны международных научных фондов, таких как ИНТАС (проекты 96-0467, 97-2018, 03-50-4409, 04-83-3607, 05-109-4595, 05-1000008-7801, 06-1000013-9225), программа Наука ради мира научного комитета НАТО (проекты SfP-972614, PST.CLG.980375 и SfP-981051) и в рамках Белорусско-Германского соглашения в области исследований (проекты WEI-001-98 и BEL-01-01).

2. Базовый формализм электродинамики УНТ

УНТ – углеродная макромолекула, получаемая сворачиванием плоского графитового слоя в цилиндр. Типичный радиус УНТ лежит в пределах 5–20 нм, тогда как ее длина может достигать нескольких микрон. Геометрическая конфигурация УНТ зависит от направления вектора сворачивания $\mathbf{R}_c$ и классифицируется дуальным индексом (m, n) с $(m, 0)$ для zigzag УНТ и (m, m) для armchair УНТ (рис. 1).

Наш подход к описанию электромагнитного отклика УНТ основан на методе эффективных граничных условий (ЭГУ), первоначально развитом в теории антенн [17, 21] для периодических структур с периодом, значительно меньшим длины волны в свободном пространстве. В отношении УНТ метод ЭГУ применим в широком частотном диапазоне – от СВЧ до рентгеновского – там, где длина волны превышает длину C–C связи в графите $b = 0.142$ нм. Такой подход

определяет общий метод решения широкого круга задач электродинамики наноструктур.

Идея метода состоит в том, что периодическая структура заменяется гладкой однородной поверхностью, на которой определяются подходящие ЭГУ для электромагнитного поля. ЭГУ выбираются таким образом, что пространственная структура электромагнитного поля, индуцированного эффективным током, текущим по однородной гладкой поверхности, и пространственная структура поля реального тока в решетке оказываются идентичными на достаточно большом расстоянии от поверхности. Параметры решетки при этом включаются в коэффициенты ЭГУ. ЭГУ возникают в результате усреднения микроскопических полей по физически бесконечно малому элементу цилиндрической поверхности. Принимая непрерывность тангенциальной составляющей электрического и аксиальной компоненты магнитного полей на поверхности УНТ, и воспользовавшись уравнением для аксиальной проводимости УНТ [26, 28], получаем:

$$\begin{aligned} E_{\phi,z} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}+0} - E_{\phi,z} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}-0} &= 0, & H_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}+0} - H_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}-0} &= 0, \\ H_{\phi} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}+0} - H_{\phi} \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}-0} &= \frac{4\pi}{c} \sigma_{zz}(\omega) E_z \Big|_{\rho=R_{\text{cn}}} . \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\sigma_{zz}(\omega)$ – аксиальная проводимость УНТ, R_{cn} – ее радиус. Пространственная дисперсия вводится в ЭГУ заменой $\sigma_{zz}(\omega) \rightarrow \sigma_{zz}(\omega) / [1 + \gamma(\omega) \partial^2 / \partial^2 z]$, где $\gamma(\omega) = l_0 / [k(1 + i / \omega\tau)]^2$, $k = \omega / c$, τ – среднее время свободного пробега электрона. Величина l_0 характеризует вклад пространственной неоднородности поля. В работах [26, 28] показано, что для металлических УНТ $l_0 \sim 10^{-5}$.

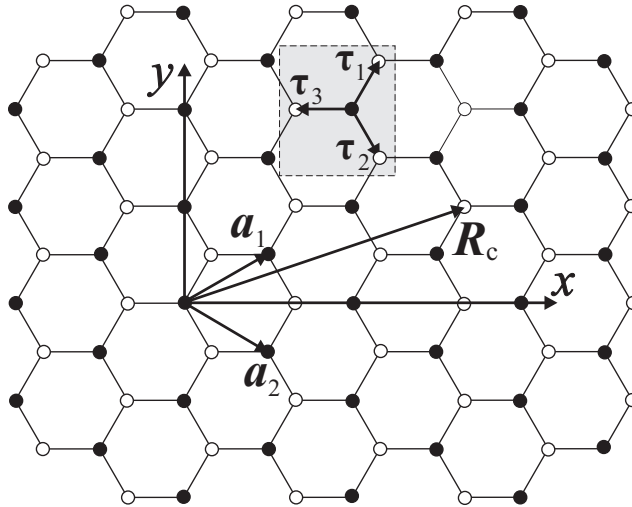


Рис. 1. Кристаллическая решетка графитового монослоя

$$\mathbf{R}_c = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2, \quad |\mathbf{a}_{1,2}| = b\sqrt{3}, \quad b = 0.142 \text{ нм} - \text{длина С-С связи в графите}$$

Равенства (1) образуют полную систему ЭГУ для электромагнитного поля на поверхности нанотрубки. Их вид аналогичен эквивалентным граничным условиям Вайнштейна – Сивова [15, 21] для сетчатых структур и частопериодических решеток в классической электродинамике СВЧ. Однако в отличие от электродинамики СВЧ, имеющей дело либо с проводниками, либо с диэлектриками, проводимость УНТ является сложной функцией внутренних параметров. Установление проводимости является критической проблемой электродинамики УНТ. Математически эта проблема формулируется системой нелинейных в общем случае уравнений для элементов матрицы плотности [64]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{cc}}{\partial t} + eE_z \frac{\partial \rho_{cc}}{\partial p_z} &= -\frac{i}{\hbar} eE_z (R_{cv}^* \rho_{cv} - R_{cv} \rho_{vc}), \\ \frac{\partial \rho_{cv}}{\partial t} + eE_z \frac{\partial \rho_{cv}}{\partial p_z} &= \frac{i}{\hbar} eE_z [R_{cv} (\rho_{vv} - \rho_{cc}) + (R_{cc} - R_{vv}) \rho_{cv}] - i\omega_{vc} \rho_{cv}, \end{aligned} \quad (2)$$

где индексы v и c относятся соответственно к π -электрону в валентной зоне и в зоне проводимости, ω_{vc} – частота перехода. Матричные элементы $R_{ll'}$ ($l, l' = c, v$) выражаются через амплитуды функций Блоха u_l следующим образом:

$$R_{ll'} = -\frac{i\hbar}{2} \int \left(u_l^* \frac{\partial u_{l'}}{\partial p_z} - u_{l'} \frac{\partial u_l^*}{\partial p_z} \right) d^3 \mathbf{r}. \quad (3)$$

Система (2) описывает динамику электронов в УНТ во внешнем электрическом поле и учитывает как внутри-, так и межзонные переходы. Релаксация может быть введена в рассмотрение феноменологически заменой $\omega_{vc} \rightarrow \omega_{vc} + i/\tau$. Вычисление матричных элементов $R_{ll'}$ (3) является стартовой процедурой анализа проводимости УНТ. Дальнейшее решение системы (2) устанавливает закон проводимости УНТ как в линейном (после линеаризации системы уравнений), так и в нелинейном режимах [64].

3. УНТ как нановолновод поверхностных волн

Проблема распространения поверхностных волн вдоль изолированной бесконечно длинной УНТ в свободном пространстве аналогична задаче о собственных волнах спиральных замедляющих систем СВЧ диапазона [15]. Используя условия излучения на бесконечности ($\rho \rightarrow \infty$) можно выразить скалярный потенциал Герца Π_e через модифицированные функции Бесселя первого и второго рода $I_\ell(x)$ и $K_\ell(x)$:

$$\Pi_e \cong e^{ihz} e^{il\phi} \begin{cases} I_l(\kappa\rho) K_l(\kappa R_{cn}), & \rho < R_{cn}, \\ I_l(\kappa R_{cn}) K_l(\kappa\rho), & \rho > R_{cn}, \end{cases} \quad (4)$$

где $\kappa = \sqrt{h^2 - k^2}$. Данное представление непосредственно удовлетворяет первому условию ЭГУ (1). Тогда дисперсионное соотношение для поверхностных волн в УНТ записывается в виде

$$\left(\frac{\kappa}{k}\right)^2 I_l(\kappa R_{\text{cn}}) K_l(\kappa R_{\text{cn}}) = \frac{ic}{4\pi k R_{\text{cn}} \sigma_{zz}} [1 - \gamma(\omega)(k^2 + \kappa^2)]. \quad (5)$$

На рисунке 2 представлены результаты расчетов по формуле (5) комплексного коэффициента замедления $\beta = k/h$ азимутально-симметричной ($l=0$) поверхностной волны в металлической (9,0) УНТ. Обсуждение азимутально-несимметричных мод дано в [26]. В низкочастотном режиме, где $kb < 10^{-7}$, имеет место сильное затухание ($\text{Im}(\beta) \sim \text{Re}(\beta)$). Таким образом, в этом режиме УНТ как волноводы поверхностных волн не представляют интереса. Существенно, что при этом для типичных длин $l_{\text{cn}} \sim 1 \text{ мкм}$ выполняется условие $l_{\text{cn}} \text{Re}(h) \ll 1$. Это означает, что УНТ проводят низкочастотные электрические сигналы подобно электрическим цепям, без сопутствующих волновых эффектов. В инфракрасной области ($10^{-5} < kb < 10^{-3}$) ситуация кардинально изменяется – УНТ допускает распространение слабозатухающих волн с практически частотно-независимыми коэффициентом замедления и фазовой скоростью $v_{\text{ph}} = \text{Re}(\omega/h)$. Таким образом, анализ распространения поверхностных волн в УНТ приводит к заключениям, определяющим потенциал УНТ как элементов высокочастотных цепей: в ИК диапазоне УНТ (а) **является сильно замедляющей системой** с коэффициентом замедления $\beta \cong 0.02$ и (б) **может служить бездисперсионным волноводом поверхностных волн**.

Практическое применение УНТ в качестве волноведущих структур и элементов антенн требует создания в них различных типов нерегулярностей, подобных тем, что формируются в обычных макроскопических волноводах.

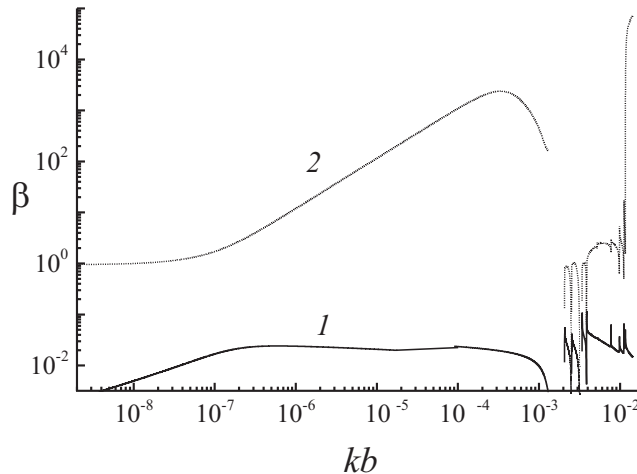


Рис. 2. Коэффициент замедления $\beta = k/h$ для азимутально-симметричной ($l=0$) поверхностной волны в металлической (9,0) УНТ: 1 – $\text{Re}(\beta)$; 2 – $\text{Re}(\beta)/\text{Im}(\beta)$; $\tau = 3 \times 10^{-12} \text{ с}$ [26]

В УНТ экспериментально наблюдается целый ряд таких нерегулярностей – допирование кристаллической решетки примесными атомами, соединение УНТ различных радиусов, Т- и Y-образные ветвления, скрещивания УНТ. Введение нерегулярностей в макроскопические волноводы не изменяет их электронных свойств и проявляется в рассеянии электромагнитных волн и трансформации спектра собственных мод. В отличие от этого, нерегулярности в нановолноводе могут кардинальным образом изменить характер его проводимости.

4. УНТ как наноантенна в терагерцовом диапазоне

Прикладной интерес к электродинамике УНТ обусловлен, в частности, перспективой реализации наноразмерных антенн [29, 67–73]. Действительно, при реальных микронных длинах УНТ, для них выполняются условия $kR_{\text{cn}} \ll 1$, $kl_{\text{cn}} \sim 1$, которые являются типичными для проволочных антенн СВЧ диапазона [15] и которые определяют возможность реализации наноантенны на базе УНТ. При этом были отмечены широкие возможности управления с ее помощью различными характеристиками электромагнитного излучения (поляризация, диаграмма направленности, эффективность излучения) и потенциальная возможность создания эффективного электрического контакта между наноустройствами и макромиром. Другое применение – это беспроводное соединение с нанодатчиками. Реализация таких антенн на практике требует создания адекватной теории. При этом одним из ключевых аспектов является учет конечной длины нанотрубки. Эта проблема является ключевой и для построения корректной теории электромагнитного отклика композитов на основе УНТ.

Для УНТ характерна сильная геометрическая анизотропия (длина значительно превышает радиус), а радиус значительно меньше длины волны в рабочем диапазоне частот. В этом смысле макроскопическим аналогом УН является вибраторная антенна для радиоволн. Адекватная теория одиночных вибраторов [74] построена на основе метода интегральных уравнений. Можно ожидать, что этот метод окажется эффективным и для УНТ. Однако прямой перенос интегральных уравнений антенных вибраторов на случай УНТ не является возможным. Антенные вибраторы в диапазоне радиоволн с высокой степенью точности рассматриваются как идеальные проводники [74]. Граничные условия электромагнитного поля в УНТ имеют принципиально иной характер: они представляют собой двухсторонние граничные условия импедансного типа (1). Это приводит к тому, что интегральные уравнения вибраторов требуют кардинальной модификации при переходе к УНТ.

Не останавливаясь на математических деталях анализа [34], приведем базовый результат – интегро-дифференциальное уравнение для нахождения тока $j(z)$ в вибраторе любой проводимости σ_{zz}

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(k^2 - \frac{i\omega}{2\pi\sigma_{zz}R_{\text{cn}}X} \right) \right\} j(z) = -\frac{i\omega}{2\pi R_{\text{cn}}X} E_{0z}(z) + \frac{1}{X} \left[\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right] V(z, j(z)), \quad (6)$$

в котором

$$V(z, j(z)) = \int_{-L/2}^{L/2} \ln(2p |z - z'|) \left[\frac{z - z'}{|z - z'|} \frac{\partial j(z')}{\partial z'} - ikj(z') \right] e^{ik|z - z'|} dz'$$

и $X = -2K_0(\sqrt{\kappa^2 - k^2} R_{\text{cn}}) I_0(\sqrt{\kappa^2 - k^2} R_{\text{cn}})$. Уравнение получено путем решения краевой задачи электродинамики на основе граничных условий (1). Первый член в правой части (6) описывает действие сторонней ЭДС, а второй член – влияние распределения тока по трубке (собственная ЭДС) и включает в себя члены, определяемые запаздыванием взаимодействия. При $\sigma_{zz} \rightarrow \infty$ (6) сводится к уравнению Леонтовича – Левина для идеально проводящего вибратора [74].

На рисунке 3 показано, что изменение диаграммы направленности УНТ с изменением ее длины и угла падения. Как видно, учет конечной длины является принципиальным для определения излучающих свойств УНТ. Из анализа (6) также следует, что поляризуемость УНТ имеет резонансный характер в низкочастотном диапазоне (рис. 4). Природа резонансов связана с конечностью длины УНТ. В силу существенного, $\beta \cong 0.02$, замедления электромагнитных волн в УНТ, геометрические резонансы смещаются в ИК и даже СВЧ (для полупроводниковых УНТ) диапазоны. Например, поляризация полупроводниковой УНТ (23,0) длиной 1 мкм имеет резонансный отклик на частоте 180 ГГц. Поэтому полупроводниковые УНТ будут вносить заметный вклад в поляризуемость композита на их основе в области низких частот.

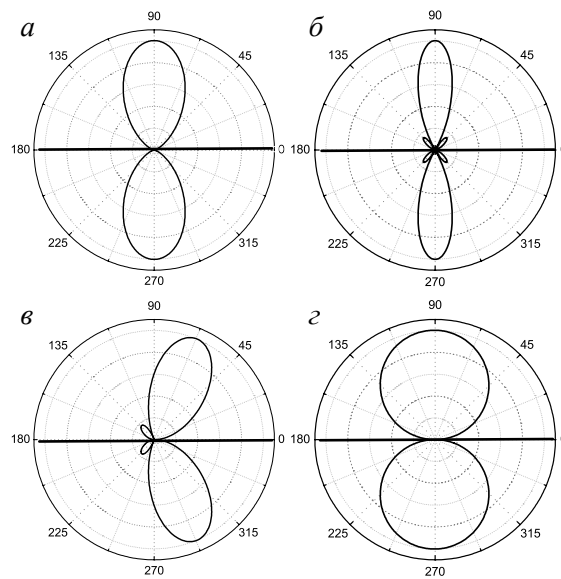


Рис. 3. Диаграмма направленности для УНТ (9,0) при разной длине трубки: $l_{\text{cn}} = \lambda$ (а, в), $l_{\text{cn}} = 2\lambda$ (б) и разных углах падения света: 90° (а, б, г), 60° (в) [34]. Диаграмма (д) соответствует длинноволновому пределу $L \ll \lambda$, $\lambda = 432.4$ нм. Горизонтальная линия указывает ориентацию УНТ

Таким образом, нами впервые описаны антенные свойства углеродной трубки в оптической и терагерцовой областях частот. Теория охватывает различные типы некиральных УНТ и различные диапазоны частот: низкие частоты, область квантовых переходов, окрестность плазменного резонанса. Теория основывается на квантовой микроскопической модели проводимости УНТ и строгом решении граничной задачи электродинамики для УН конечной длины. Кроме того, проведенные теоретические расчеты позволили дать удовлетворительное объяснение экспериментально зарегистрированному несоответствию поведения частотной дисперсии проводимости композитов из УНТ предсказаниям теории Друде для объемной среды [75]. Установлено, что экспериментально зарегистрированный резонанс поглощения в дальнем ИК диапазоне [76–77] может быть объяснен резонансом поверхностных волн на конечной длине нанотрубки.

При рассмотрении УНТ как передающей антенны возникает вопрос о физической реализации источника ЭДС (как указано в [73], в настоящее время этот вопрос не вполне ясен). Один из возможных путей аналогичен обычным радиочастотным антеннам, но вместо макроскопических металлических проводов могут быть использованы полупроводниковые нанопровода (см. также [67]). Другой подход: в качестве источника возбуждения используется фотолюминесценция квантового излучателя, размещенного внутри УНТ. В качестве последнего могут фигурировать макромолекулы, полупроводниковые квантовые точки, металлофуллерены (см. разд. 8).

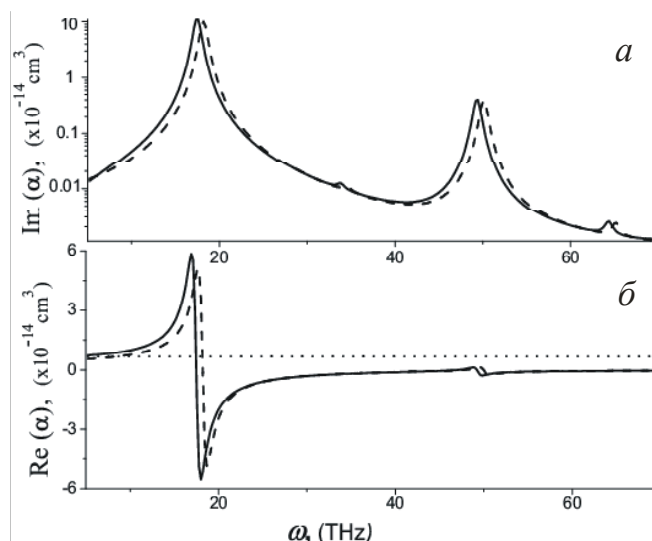


Рис. 4. Частотные зависимости мнимой (а) и действительной (б) части диэлектрической восприимчивости нанотрубки (9,0) [34]. Сплошная и пунктирная кривые представляют точное численное и приближенное решения соответственно. Кривая из точек рассчитана для идеально проводящей трубки

Одной из важнейших тенденций развития электроники является интеграция, приводящая к увеличению пространственной плотности электронных компонентов в системах передачи и обработки информации. Это порождает про-

блему электромагнитной совместимости, заключающейся в установлении паразитных связей электронных компонентов посредством их ближних и промежуточных электромагнитных полей. Современная наноэлектроника характеризуется максимально высокой степенью интеграции. Это дает основание предположить, что проблема электромагнитной совместимости будет проявляться в ней особенно остро. В этой связи становится актуальным исследование структуры электромагнитного поля в ближней и промежуточной зонах антенн на основе углеродной нанотрубки, что позволит в дальнейшем рассмотреть проблему их электромагнитной совместимости и проблему взаимодействия трубок в композитном материале.

Решение уравнения (6) позволило определить токи в УНТ и затем на частотах геометрических (антенных) резонансах выяснить характер распределения поля излучения вблизи нанотрубки [35]. При этом установлено, что дальняя зона УНТ формируется на расстоянии $r/L \geq 1/s\beta$ (s – номер антенного резонанса) (рис. 5). Данный результат имеет принципиальное физическое значение: размеры ближней и промежуточной зон, нормализованные к характерному размеру объекта (применительно к УНТ – длине L), возрастают с увеличением замедления рабочей волны. Наноструктурные элементы характеризуются сильным замедлением, что приводит к значительной величине эффекта. Так, используя оценку $\beta \approx 0.02$ для металлической УНТ на частоте первого геометрического резонанса, условия для границ ближней и дальней зоны будут соответственно $r/L \ll 15$ и $r/L \geq 50$, в то время как для границы дальней зоны макроскопического проводящего вибратора $r/L \geq 1$.

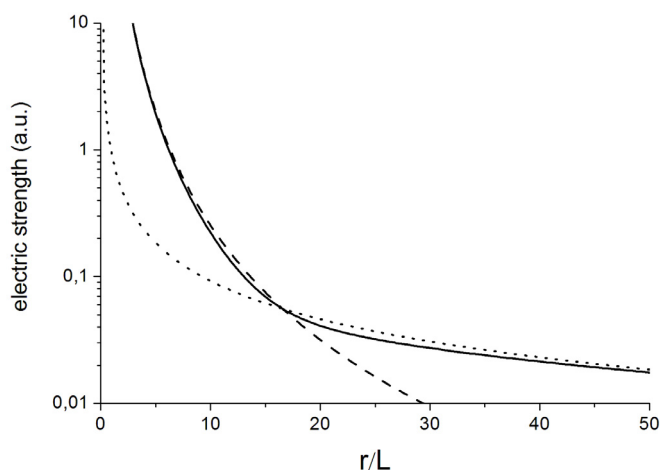


Рис. 5. Изменение напряженности поля вблизи УНТ при удалении от геометрического центра углеродной нанотрубки в перпендикулярном от нее направлении (сплошная кривая). Расстояние до нанотрубки по оси X нормировано на длину УНТ. Поле ближней зоны – пунктирная кривая, поле дальней зоны – кривая из точек

Помимо одиночных нанотрубок впервые теоретически исследованы электромагнитные свойства УНТ пучков из металлических углеродных нанотрубок конечных размеров. При этом установлено, что в УНТ пучке могут распростра-

няться симметричные и несимметричные моды с различным характером поперечного распределения поля внутри пучка. С ростом поперечных размеров УНТ пучков замедление поверхностных мод уменьшается и стремится к единице для пучков больших радиусов ($R > 25$ нм), что характерно для макроскопических металлических проводов. Данный результат качественно согласуется с результатами работы [70], где в видимой области экспериментально зарегистрированы антенные резонансы многослойных углеродных нанотрубок больших поперечных размеров и указано на малое замедление собственных мод исследуемых нанотрубок. Увеличение коэффициента замедления собственных мод УНТ пучка с ростом числа трубок в нем приводит к смещению геометрических резонансов поляризуемости УНТ пучков с терагерцовой области в ближний ИК диапазон (рис. 6). В отличие от одиночной нанотрубки (сравните рис. 4 и 6) в частотной зависимости диэлектрической восприимчивости УНТ пучков в длинноволновом режиме имеют место несколько геометрических резонансов, соответствующих различным собственным модам УНТ пучка. В связи с малым замедлением собственных мод УНТ пучков их антенная эффективность близка к единице и на несколько порядков превышает таковую для одиночных УНТ. Таким образом, вариация числа трубок в пучке является еще одной степенью свободы при создании антенн и композитных материалов на основе углеродных нанотрубок с новыми функциональными возможностями в широком интервале частот от терагерцового до ближнего инфракрасного диапазонов.

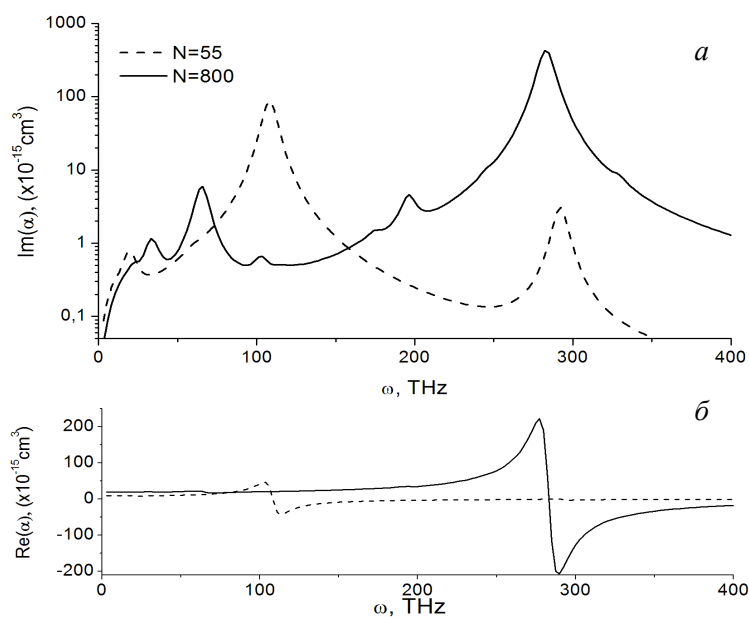


Рис. 6. Частотные зависимости мнимой (а) и действительной (б) части диэлектрической восприимчивости пучка из 55 (пунктирная кривая) и 800 (сплошная кривая) нанотрубок (21,0)

5. Тепловое излучение из углеродных нанотрубок

В данном разделе исследуется тепловое излучение из однослойных металлических некиральных УНТ. При анализе использовалась флуктуационно-диссипативная теорема. Уравнение Дайсона для запаздывающего фотонного пропагатора было модифицировано для случая однослойных углеродных нанотрубок, для того чтобы учесть эффект конечной длины углеродной нанотрубки, а также реальную динамику π -электронов в ней. Был разработан численный метод для решения модифицированного уравнения Дайсона. Этот метод основывается на квадратурной аппроксимации интегрального оператора с последующим переходом к системе матричных уравнений конечного порядка.

Частотный спектр теплового излучения в ближней, промежуточной и дальней зонах был исследован. Было показано, что спектр теплового излучения углеродных нанотрубок существенным образом отличается от спектра излучения абсолютно черного тела. В частности, спектр теплового излучения проводящих углеродных нанотрубок типа «zigzag» представляет собой ряд дискретных линий на фоне непрерывного шума. Два различных подсемейства спектральных линий можно выделить в данном спектре: одно из этих подсемейств исчезает в дальней зоне, в то время как второе остается (рис. 7).

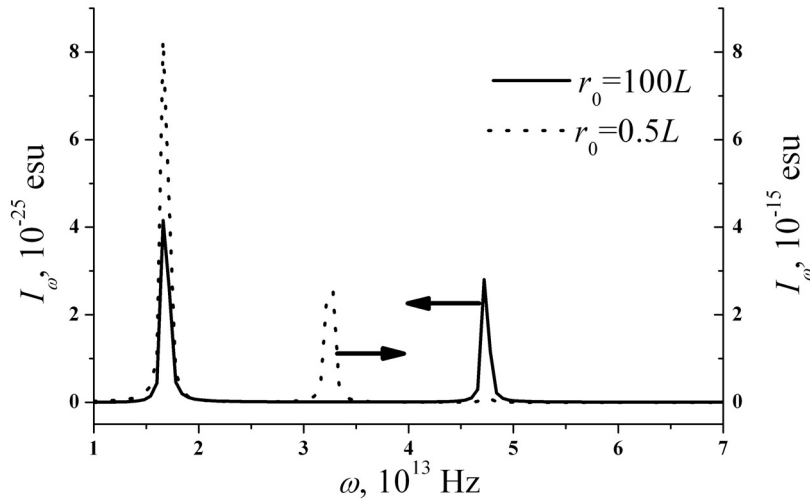


Рис. 7. Спектральные характеристики интенсивности теплового излучения I_ω однослойной (15,0) «zigzag» углеродной нанотрубки. В данном случае r_0 – расстояние между геометрическим центром углеродной нанотрубки и точкой наблюдения, $L = 10^{-4}$ см – длина углеродной нанотрубки. Предполагается, что угол между осью углеродной нанотрубки и направлением из геометрического центра углеродной нанотрубки в точку наблюдения равен $\pi/2$

С физической точки зрения данные результаты могут быть проинтерпретированы как радикальная трансформация локальной вакуумной плотности состояний под влиянием углеродной нанотрубки. Данный факт, в частности,

обусловлен способностью металлических углеродных нанотрубок к поддержанию распространения сильно замедленных слабо затухающих поверхностных плазмонов в ТГц и ИК спектральных диапазонах. Дискретная спектральная структура обусловлена наличием геометрических резонансов поверхностных плазмонов. Спектральные линии, остающиеся в дальней зоне соответствуют дипольным резонансам в то время как исчезающие – квадрупольным.

Полученные результаты позволяют рассматривать УНТ как перспективный элемент для создания когерентных источников направленного теплового излучения (тепловые антенны на основе фотонных кристаллов были предложены ранее [78]).

6. Композиты на основе различных форм нанок углерода

Развитые подходы к описанию электромагнитного отклика композитных материалов на основе УНТ могут быть распространены на нанокompозиты с другими формами наночастиц углерода. В частности, в рамках широкого научного сотрудничества с учеными СО РАН, США и Бельгии начаты экспериментальные и теоретические исследования композитов с луковичными формами углерода [79] в качестве наполнителя. Эти исследования позволили нам предложить ЛФУ в качестве базовой компоненты для создания широкополосных радиопоглощающих материалов [66]. ЛФУ обладают разнообразными электрическими и оптическими свойствами, которые управляются изменением размеров агрегатов и условиями их синтеза [80]. Мы предполагаем, что такие материалы позволят существенным образом снизить толщину покрытий при сохранении их высокой эффективности.

Таблица 1

Характеристики материалов и экранирующие электромагнитные свойства различных типов ЛФУ (OLC –1,2,3,4) в сравнении с образцами многослойных УНТ (MWNT), волокнистого углерода (CFC–1,2), наноалмазов и сажи [66].

Образцы	Отжиг ДНА, температура/время	Содержание магнитных металлических примесей, % от веса	Плотность порошка г/см ³	Максимальные потери на пропускание		
				26–37 ГГц	8–12 ГГц	2–5 ГГц
OLC-1	1800K/3ч	0.1/Fe	0.45	–50.0	–11	Смесь ЛФУ (15% от веса) и ДНА
OLC -2	2140K/3ч	0.1/Fe	0.36	–46.0	–8.8	
OLC -3	1900K/3ч	0.15/Fe, 0.015/Cr	0.20	–21.0	–8.0	
OLC -4	1800K/3ч	0.15/Fe, 0.15/Cr	0.25	–30.0	–6.0	
MWNT	–	0.9/Fe, 0.4/Co	0.10	–42.0	–	–
CFC-1	–	0.9/Ni	0.82	–42.0	–9.0	–23.0
CFC-2	–	0.3/Ni	0.55	54.0	–5.9	–24.0
ДНА	–	0.3/Cr, 0.1 Fe	0.37	–	–	–5.6
Сажа	–	1.3/Fe	0.42	–	–	–10.1

Экспериментальные исследования были выполнены для двух наборов образцов: а) ЛФУ порошки, полученные из детонационных наноалмазов (ДНА) различного происхождения; б) полимерные пленки (ПММА) с ЛФУ в качестве наполнителя. Образцы были изготовлены в Институте катализа СО РАН и в Международном технологическом центре (Рэлей, США). Наноалмазы синтезируются при высоких температурах и давлениях, вызванных детонацией углерода от взрывной ударной волны в отсутствие кислорода. Средние размеры частиц 4 – 5 нм. Частицы сажи, не подвергшиеся детонации, изолируются посредством окислительного удаления горячей смесью концентрированных кислот H_2SO_4 и HCl [79–80] или обработкой озоном. Отжиг ДНА порошка в вакууме при высокой температуре приводит к возникновению углеродных наночастиц со структурой ЛФУ [79–80]. Характеристики исследованных порошков приведены в табл. 1. Более подробная информация может быть найдена в [66].

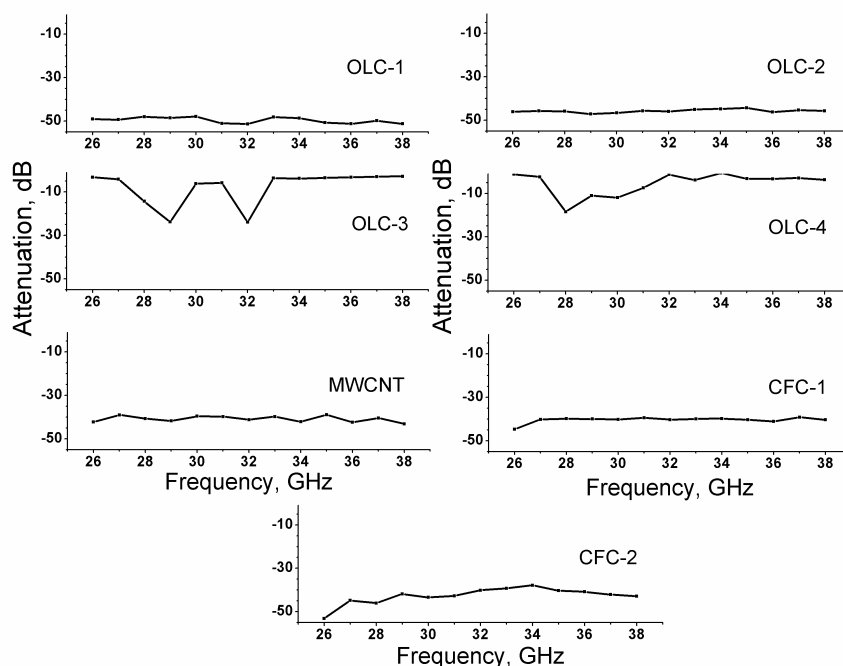


Рис. 8. Ослабление в порошках ЛФУ (образцы OLC), многостенных углеродных нанотрубок (MWCNT) МУНТ и каталитических волокон углерода (образцы CFC) в Ка-диапазоне [66]

Измерение поглощения электромагнитного излучения порошками ЛФУ и композитными пленками выполнялись в диапазоне 2–37 ГГц. Далее мы проведем обсуждения результатов для Ка-диапазона (26–37 ГГц) и дадим только краткие комментарии относительно S- (2–5 ГГц) и X- (8–12 ГГц) диапазонов. Для образцов с аббревиатурами OLC–1, OLC–2, MWNT, CFC–1 и CFC–2 (см. табл. 1), рис. 8 демонстрирует однородное поглощение на протяжении всего диапазона, тогда как поглощение в образцах OLC–3 и OLC–4 существенно слабее и неоднородно. Образцы OLC–1 и OLC–2 имеют практически идентичные хими-

ческие составы и отличаются лишь технологическими особенностями получения. Порошки OLC-3 и OLC-4 отличаются присутствием Cr и меньшей плотностью. Уместно предположить, что примесь Cr может влиять на поглощение. Образцы CFC-1 и CFC-2 содержат в различных пропорциях (см. табл. 1) вместо Fe и Cr. Несмотря на это, они демонстрируют поглощение, очень схожее с таковым для образцов OLC-1 и OLC-2. В целом рис. 8 и табл. 1 показывают сильное влияние металлических примесей на поглощение. Влияние технологических особенностей получения образцов требует дополнительных исследований. Из рис. 8 можно заключить, что наилучшее ослабление (40–50 дБ) в Ка-диапазоне демонстрируют порошки ЛФУ с примесями Fe. Такие порошки можно использовать при создании экранирующих покрытий. Отметим, что в настоящее время ослабление электромагнитного излучения поглощающими материалами, такими как сажа и карбонильное железо, смешанные в различных пропорциях в эпоксидной смоле, не превышает 15–20 дБ в Ка-диапазоне и быстро падает с ростом частоты. Таким образом, *поглощающие свойства порошков УЛФ*, исследованные в работе [66], *значительно превышают поглощение в традиционных материалах.*

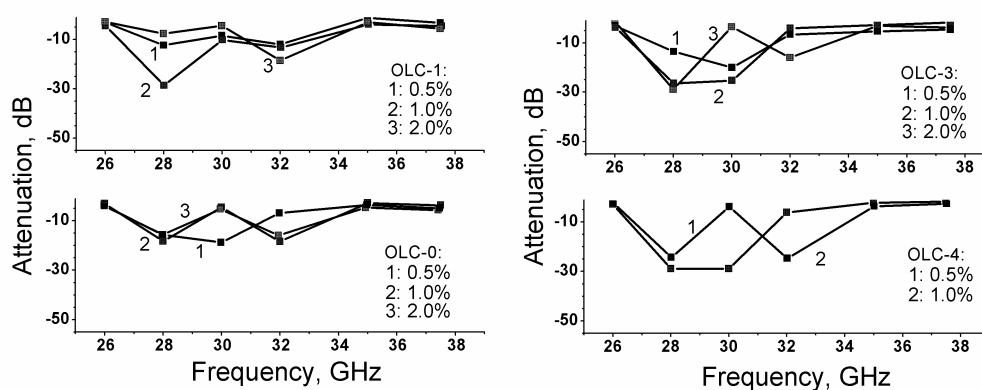


Рис. 9. Ослабление электромагнитного излучения в Ка-диапазоне в полимерных пленках с различным содержанием ЛФУ в качестве наполнителя [66]

На рисунке 9 представлены измерения электромагнитного ослабления в полимерных пленках с различным процентным содержанием УЛФ. В отличие от порошков ослабление не превышает 30 дБ и является сильно неоднородным. Указанная неоднородность является предметом текущих исследований. Все измеренные образцы демонстрируют значительное ослабление в диапазоне 28–32 ГГц, с быстрым уменьшением до 3–4 дБ при удалении от него. Изменение содержания металлических примесей не оказывает отчетливого воздействия на ослабление. Очевидно, что создание поглощающих электромагнитное излучение материалов на основе РММА пленок с УЛФ в качестве наполнителя требует больших затрат, связанных с решением вопросов с содержанием, примесями и технологией синтеза.

7. Возможность создания источника света на основе УНТ

В макроскопической электронике известны генераторы электромагнитного излучения, работающие на основе излучательной неустойчивости направленных электронных потоков, такие как лампа бегущей волны (ЛБВ), лампа обратной волны (ЛОВ), лазер на свободных электронах (ЛСЭ). Для функционирования таких приборов необходимо поддержание высокого вакуума для проводки электронных пучков. В противном случае рассеяние электронов нарушает когерентность излучения и приводит к деградации элементов системы. Для создания электронного пучка в таких приборах используются, например, вакуумные диоды. Плотность тока диодов ограничена влиянием пространственного заряда и относительно невысока ($<10\text{--}100\text{ А/см}^2$). Поэтому для генерации стимулированного излучения требуется довольно протяженная область взаимодействия (от 10 см до нескольких метров в зависимости от параметров электронного пучка и генерируемой частоты). Одним из фундаментальных свойств УНТ является установленная экспериментально [81] баллистическая электронная проводимость со свободным пробегом, составляющим несколько десятков микрон. Большой пробег электронов в нанотрубке наряду с высокой плотностью тока (согласно некоторым экспериментальным работам, большей 10^{10} А/см^2) позволяет реализовать источник стимулированного излучения, основанный на модуляции электронного потока в поле генерируемой им волны. Генерация при таких плотностях может развиваться при длинах в несколько микрон, соответствующих длинам производимых в настоящий момент нанотрубок.

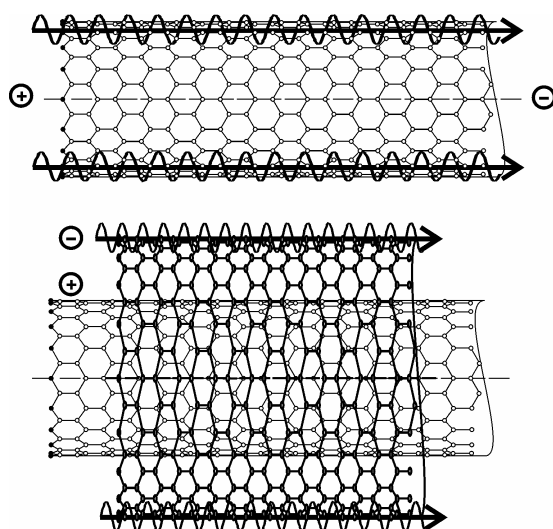


Рис. 10. Направленный электронный поток в УНТ [38]

Еще одним базовым принципом работы таких приборов является синхронизация электронного пучка и электромагнитной волны для эффективной передачи кинетической энергии пучка волне. В приборах типа ЛОВ и ЛБВ это достигается, например, путем замедления волны в гофрированной электродинамической структуре. Существенное уменьшение фазовой скорости поверхностной волны в

УНТ (см. разд. 3 и работы [26, 31, 64]) по сравнению со скоростью света обеспечивает синхронное движение нерелятивистского пучка электронов и индуцированной электромагнитной волны.

Направленный поток электронов может быть получен путем приложения напряжения к определенной части одностенной или к разным стенкам двустенной УНТ (рис. 10). Если созданы определенные резонансные условия, связанные с одним из механизмов излучения (черенковский механизм, механизм излучения осциллятора и др.), – пучок электронов может излучать фотоны. Генерируемое излучение оказывает обратное влияние на электроны и приводит к модуляции электронного потока и усилению излучения. Если при длине, меньшей длины свободного пробега электрона, наработка излучения превышает его потери, то развивается лазерная генерация [82]. На линейной стадии развития генерации излучательная неустойчивость электронного потока описывается дисперсионным уравнением:

$$k^2 - k_m^2 = -\frac{\omega_L^2}{4m_e c^2} \sum_{nl} |B_{nl}^{(m)}|^2 \left\{ \frac{1}{-\hbar\omega + \varepsilon_n(p_n) - \varepsilon_l(p_n - k)} + \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_n(p_n) - \varepsilon_l(p_n + k)} \right\}. \quad (7)$$

Мы использовали следующие определения для матричных элементов:

$$B_{nl} = \sum_{\tau\tau'} b_{l\tau} b_{n\tau'}^* \langle u_{n\tau} | (\hat{p}_n + \tau) A(k, \omega) + A(k, \omega) (\hat{p}_n + \tau) | u_{l\tau'} \rangle,$$

где $\varepsilon(p_n)$ – закон дисперсии, k – электромагнитный волновой вектор, k_m – собственные значения, соответствующие физической системе без электронного потока, ω – частота индуцированной электромагнитной волны, $\hat{p}_n$ – оператор квазиимпульса, $b_{l\tau}$ и $u_{l\tau}(r_\perp)$ постоянные коэффициенты и функции поперечной координаты разложения волновой функции электрона по собственным блоховским функциям, A – потенциал электромагнитного поля, τ – постоянная обратной решетки, ω_L – частота Лангмюра. Первый член дисперсионного уравнения (7) соответствует излучению, второй – поглощению фотона. В случае малости знаменателей этих членов взаимодействие электронного потока с электромагнитной волной очень интенсивное.

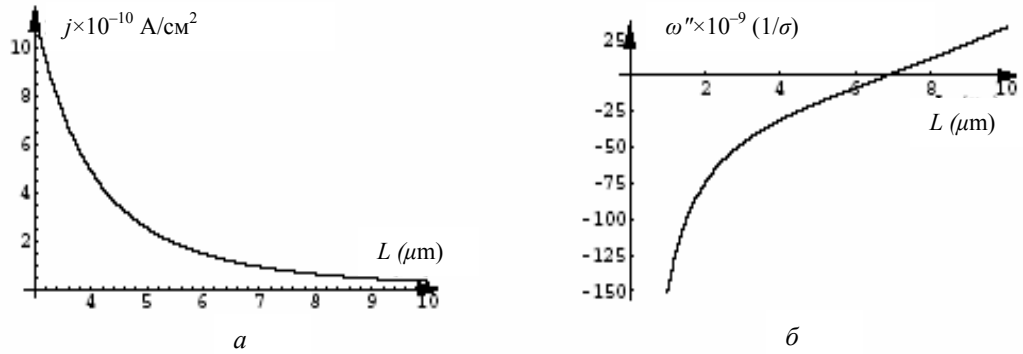


Рис. 11. Зависимость порогового тока (а) и инкремента неустойчивости (б) от длины УНТ [36]

Исследование дисперсионного уравнения позволяет определить области устойчивости и неустойчивости системы, вычислить время развития излучательной неустойчивости. Для работы в режиме генератора необходима положительная обратная связь, которая обеспечивает возврат части усиленной мощности. Один из естественных механизмов обратной связи – отражение излучения на границах. На рис. 11 приведена зависимость плотности стартового тока и инкремента неустойчивости от длины нанотрубки:

$$\frac{b_{nn}^{(m)}}{v_n^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial p_n^2} k L^3 f(x) = 1 - |\alpha| + L \operatorname{Im}(k_m), \quad \omega_m'' = \left(\frac{\partial k_m}{\partial \omega} \right)^{-1} \left(\frac{b_{nn}^{(m)}}{v_n^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial p_n^2} L^2 f(x) - \frac{1 - |\alpha|}{L} - \operatorname{Im}(k_m) \right) \quad (8)$$

Здесь v_n – групповая скорость

$$x = (\omega - k_m v_n) L / (2 v_n) \quad \text{и} \quad f(x) = (x \cos x - \sin x) / x^3$$

Расчет проведен для длины волны излучения 1 мкм. Коэффициент α выбран ~ 0.99 . Из графиков видно, что при данных параметрах генерация начинает развиваться при длине больше 6 мкм, что вполне соответствует современному технологическому уровню. Характерное время развития генерации при длине нанотрубки 10 мкм составляет 0.4 нс.

Таким образом, нами *впервые предложен* [33, 36, 38] *новый тип мономолекулярного источника когерентного излучения в ИК и терагерцовом диапазонах длин волн на основе черенковского механизма развития неустойчивости в УНТ*. Подчеркнем, что предложенная нами идея является альтернативной по отношению к существующим схемам создания источников света на основе УНТ [83–85].

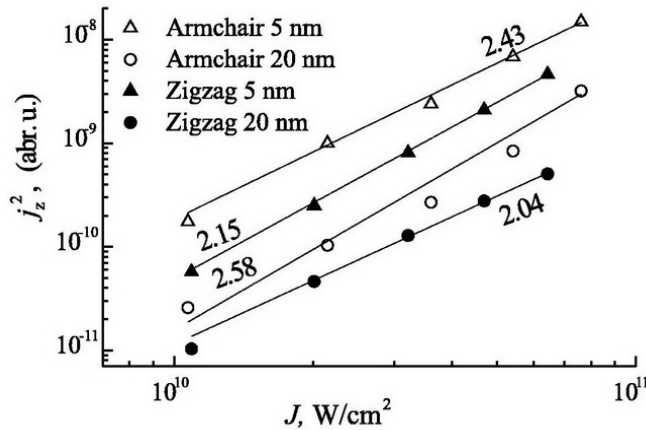


Рис. 12. Аппроксимация для параметра p в уравнении (9) [43]

8. Оптическая нелинейность УНТ

Ряд недавних теоретических и экспериментальных исследований [41–45, 86, 87] показал, что УНТ являются сильно нелинейными оптическими средами со значительным потенциалом прикладного использования в наноразмерных устройствах контроля и управления оптическим излучением. Для иллюстрации

этого утверждения рассмотрим процесс генерации третьей гармоники в УНТ, облучаемой интенсивным электромагнитным импульсом, линейно поляризованным вдоль оси УНТ и имеющим гауссову форму. Для определения плотности аксиального тока, индуцированного в УНТ, выполнено численное решение квантовых кинетических уравнений (2) [45].

Генерация третьей гармоники при нерезонансном возбуждении в кристаллах или газах в общем случае может быть описана с помощью поляризуемости третьего порядка, даже для достаточно больших интенсивностей, при которых еще не происходит разрушения вещества под действием облучающего поля. Для малых интенсивностей амплитуда тока N -й гармоники пропорциональна N -й степени амплитуды облучающего поля. Естественно было бы ожидать подобного поведения третьей гармоники в УНТ. Однако даже для интенсивностей импульса накачки меньших, чем 10^{10} Вт/см², ожидаемый степенной закон нарушается:

$$|j(N\omega)| \sim E_0^p, \quad (9)$$

причем в общем случае $p \neq N$. Этот факт указывает на то, что происходит насыщение взаимодействия УНТ с интенсивными лазерными импульсами и, следовательно, степенное разложение перестает быть справедливым. Для более детального исследования данного эффекта и его сравнения с экспериментальными данными [43] была вычислена $|j_z|^2$ как функция интенсивности падающего ультракороткого импульса. Было обнаружено, что в узкой низкоинтенсивной зоне параметр p в уравнении (9) может быть аппроксимирован числом, лежащим в диапазоне от 2.04 до 2.58, для различных типов УНТ (рис. 12). Экспериментальные результаты для третьей гармоники [43] подтверждают данное заключение. При более высоких интенсивностях облучающего поля численное моделирование предсказывает еще более значительное отклонение от степенного закона $p = N$. Рис. 13 демонстрирует насыщение третьей гармоники индуцированного тока при увеличении амплитуды импульса накачки в широком диапазоне амплитудных параметров.

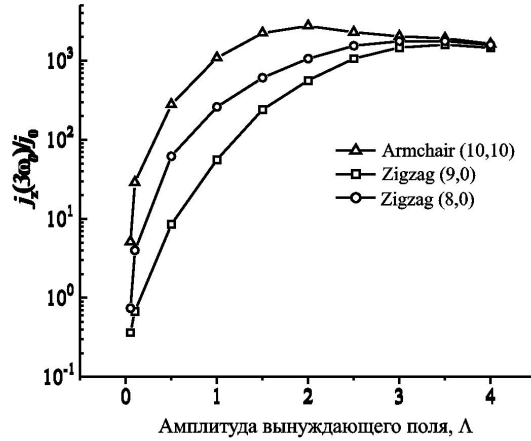


Рис. 13. Амплитуда тока третьей гармоники как функция интенсивности облучающего поля для различных типов УНТ [43]; $j_0 = e\gamma_0 / 2\pi^2 \hbar R_c$

В случае электромагнитных полей достаточно слабой интенсивности нелинейный отклик УНТ может быть описан кубической восприимчивостью. С этой целью квантовые кинетические уравнения (2) решаются аналитически методом последовательных приближений, что позволяет определить компоненту тензора кубической восприимчивости $\chi_{zzzz}^{(3)}(-3\omega; \omega, \omega, \omega)$. Результаты наших вычислений находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [87–88]. Сравнение представлено в табл. 2.

Таблица 2

Сравнение экспериментально измеренных значений кубической восприимчивости [87–88] с вычисленными теоретически [45].

$\hbar\omega$ (eV)	$\text{Im}[\chi^{(3)}], \text{esu}$ Эксперимент [87–88]	$\text{Im}[\chi^{(3)}], \text{esu}$ Теория
0.8	-1.9×10^{-8}	-3.7×10^{-8}
1.47	-10^{-9}	-6.5×10^{-9}

9. Излучение атома вблизи УНТ – механизм возбуждения нановолновода и наноантенны

Спонтанное излучение есть процесс взаимодействия возбужденного атома и вакуумных состояний электромагнитного поля. Эти состояния дифрагируют на диэлектрических телах подобно тому, как дифрагирует обычно классическое электромагнитное поле. Как результат, вероятность спонтанного распада оказывается зависящей от расположенных вблизи атома тел (эффект Парселла). Уникальной особенностью УНТ является существенное, на несколько порядков величины, увеличение скорости спонтанного распада атома вблизи УНТ по сравнению со скоростью распада в вакууме [60, 64], см. рис. 14. При расположении атома снаружи УНТ скорость спонтанного распада определяется формулой

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \xi(\omega_A) = 1 + \frac{3R_{\text{cn}}}{2\pi k_A^3} \text{Im} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \int_C \frac{\beta_A \kappa_A^4 I_p^2(\kappa_A R_{\text{cn}}) K_p^2(\kappa_A r_A)}{1 + \beta_A \kappa_A^2 R_{\text{cn}} I_p(\kappa_A R_{\text{cn}}) K_p(\kappa_A R_{\text{cn}})} dh, \quad (10)$$

где $\kappa_A = \sqrt{\hbar^2 - k_A^2}$, индекс A указывает, что помеченные величины вычисляются на частоте атомного перехода ω_A , $\Gamma_0 = 4k_A^3 |\mu_z|^2 / 3\hbar$ – скорость спонтанного распада в свободном пространстве. При расположении атома внутри УНТ ($r_A < R_{\text{cn}}$) приведенная формула модифицируется простой заменой $r_A \leftrightarrow R_{\text{cn}}$ в числителе подынтегрального выражения.

Атом, взаимодействующий со средой, может распадаться как посредством излучения реального фотона (радиационный распад), так и путем излучения виртуального фотона с последующим возбуждением в среде квази-частиц, включая поверхностные волны (нерадиационный распад). Оба канала распада представлены в зависимостях, изображенных на рис. 8. Однако нерадиационный канал дает доминирующий вклад в рост скорости распада. Радиационный канал оказывается существенным только вблизи частот межзонных переходов

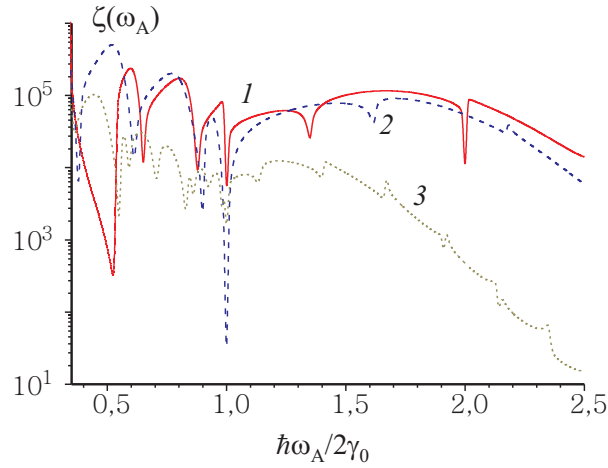


Рис. 14. Аномальное ускорение спонтанного распада атома, расположенного в центре различных УНТ типа zigzag: 1 – (9, 0), 2 – (10, 0), 3 – (23, 0), $\tau = 3 \times 10^{-12}$ с, $\gamma_0 = 2.7$ эВ [60]

(резонансные минимумы на рис. 14). Таким образом, *нерадиационный канал атомного распада вблизи УНТ может служить средством возбуждения поверхностных волн в УНТ, т. е. – средством возбуждения нановолновода и наноантенны*. Особенно интригующей данная идея выглядит применительно к упомянутым выше пиподам типа $[(\text{Gd}@\text{C}_{82})_n@\text{SWNT}]$ – одностенным УНТ, заполненным металлофуллеренами. В таких системах атомы Gd находятся внутри УНТ на заданном одинаковом расстоянии от ее стенок и обеспечивают условия для возникновения эффекта Парсела.

10. Роль локальных полей в электродинамике КТ

Как уже указывалось ранее, эффект пространственного ограничения движения носителей заряда в квантовых точках приводит к дискретизации энергетического спектра локализованного в КТ экситона, что обеспечивает возможность создания инверсной населенности в КТ и, как следствие, их использование для разработки нового поколения полупроводниковых светоизлучающих приборов. Однако при этом остается в тени класс эффектов, связанных с дифракцией электромагнитных волн на КТ и приводящих к существенной модификации электромагнитного отклика КТ и их массивов. Действительно, резонансная природа экситона в КТ, феноменологически моделируемая в однорезонансном приближении лоренцевской диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_h + \frac{g_0}{\omega - \omega_0 + i\Gamma_{\text{hom}}} , \quad (11)$$

приводит к весьма заметному скачку диэлектрической функции на границах КТ при частотах, близких к частоте экситона ω_0 (рис. 15) и, следовательно, к дифракции электромагнитного поля на КТ. В формуле (11) Γ_{hom} – однородная ши-

рина линии экситона, $g_0 = 4\pi w |\mu_0|^2 / 3\hbar V_{QD}$, где μ_0 – дипольный момент объемного образца, V_{QD} – объем КТ, $w = \pm 1$ – населенность экситонного уровня. Знак + соответствует возбужденной КТ. Параметр ε_h предполагается действительным, частотно-независимым и равным диэлектрической проницаемости окружающей среды.

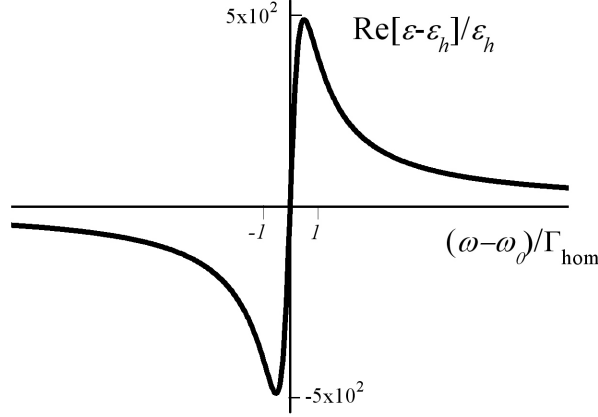


Рис. 15. Поведение действительной части диэлектрической проницаемости КТ, $\text{Re}[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_h] / \varepsilon_h$, для типичных значений параметров $\Gamma_{\text{hom}} = 6.7 \times 10^9 \text{ с}^{-1}$ и $g_0 = 8 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$

Дифракция изменяет структуру поля как внутри, так и снаружи КТ и делает поле неоднородным на характерных размерах КТ (5–10 нм), значительно меньших, чем длина волны в окружающей среде. Электромагнитный отклик среды определяется ее поляризацией под действием внешнего поля. В объемных средах эта поляризация задается хорошо известным соотношением $\mathbf{P} = (\varepsilon(\omega) / \varepsilon_h - 1) \mathbf{E} / 4\pi$. Поскольку линейный размер КТ много меньше длины волны, можно ограничиться дипольным приближением $\mathbf{P} = \alpha(\omega) \mathbf{E} / 4\pi$, в котором $\alpha(\omega)$ – поляризуемость КТ. Для сферической КТ радиуса R_{QD} в первом приближении

$$\alpha(\omega) = \alpha_0(\omega) = R_{QD}^3 \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_h}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_h}. \quad (12)$$

Более строгий анализ [49] дает

$$\alpha(\omega) \approx \frac{\alpha_0(\omega)}{1 - \frac{2}{3} i (k\sqrt{\varepsilon_h})^3 \alpha_0(\omega)} = \frac{R_{QD}^3}{3\varepsilon_h} \frac{g_0}{\omega - \tilde{\omega}_0 + i\tilde{\Gamma}}, \quad (13)$$

где $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 - g_0 / 3\varepsilon_h$, $\tilde{\Gamma} = \Gamma_{\text{hom}} - w\Gamma_0 / 3$ и $\Gamma_0 = 2(kR_{QD}\sqrt{\varepsilon_h})^3 g_0 / 3\varepsilon_h$ – скорость спонтанного распада КТ. Таким образом, **учет эффектов локального поля в КТ**

приводит к сдвигу экситонного резонанса и изменению скорости его релаксации. Для GaAs сферических КТ с радиусом $R_{QD} = 3$ нм и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_h = 12$, при длине волны 1.3 мкм и ширине линии спонтанного распада $\Gamma_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$, получаем оценку частотного сдвига экситонного резонанса $\hbar\Delta\omega \sim 1$ мэВ. Важно отметить, что смещение экситонного резонанса зависит от состояния КТ: оно является голубым для невозбужденной КТ и красным в противоположном случае.

На первый взгляд, сдвиг экситонного резонанса в КТ является скорее перенормировкой энергетического уровня, чем наблюдаемым эффектом. Действительно, наблюдение такого сдвига невозможно в сферически симметричных КТ, находящихся в заданном состоянии. Ситуация меняется в случае точек более сложной формы, когда сдвиг резонансной частоты становится зависящим от поляризации падающей электромагнитной волны. В результате мы приходим к поляризационно-зависимому расщеплению линии усиления в КТ [45, 47].

Строгая квантово-электродинамическая теория взаимодействия КТ с электромагнитным полем с учетом локальных полей представлена в [61], где получена обусловленная локальным полем поправка к гамильтониану взаимодействия света с КТ:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_L + \frac{4\pi}{3} P(-\mu\hat{b}^+ + \mu^*\hat{b}). \quad (14)$$

В этом выражении первый член описывает движение носителей заряда в КТ, второй член является стандартным гамильтонианом Джейнса – Куммингса, описывающим взаимодействие системы с полем [23], а последний член является указанной поправкой; P – макроскопическая поляризация КТ, $\hat{b}^+, \hat{b}$ – операторы рождения и уничтожения экситона в КТ. Анализ взаимодействия КТ с квантовым светом, описываемого гамильтонианом (14), приводит к следующим заключениям.

Резонансное взаимодействие неклассического света с КТ реализуется через два различных механизма. Первый из них, квазиклассический, связан с макроскопической поляризацией среды во внешнем электромагнитном поле. Этот механизм обеспечивает деполаризационный сдвиг резонансной частоты, голубой для КТ в основном состоянии и красный для возбужденной КТ. Сдвиг экситонного резонанса наблюдается для состояний света, порождающих макроскопическую поляризацию среды, т. е. для классического света и любых других состояний с неопределенным числом фотонов. Величина сдвига зависит только от геометрии КТ и ее электронных свойств. Второй механизм взаимодействия света с КТ имеет квантово-электродинамическое происхождение и не может быть проинтерпретирован в рамках классической электродинамики. Этот механизм оставляет резонансную частоту несмещенной и реализуется в полях с заданным числом фотонов, таких как спонтанное излучение и поглощение одиночного фотона. Таким образом, мы предсказываем тонкую структуру линии экситона в КТ, взаимодействующей с квантовым светом (рис. 16). Интенсивности компонент тонкой структуры определяются статистикой квантового света.

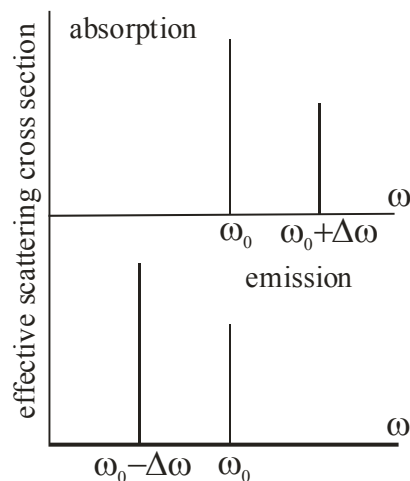


Рис. 16. Тонкая структура электромагнитного отклика КТ в квантовом свете [61]. Верхний рисунок соответствует случаю поглощения, а нижний – излучения света

В физике полупроводников сложилась устойчивая концепция экситонного газа как системы свободно движущихся в безграничной полупроводниковой среде квази-частиц – экситонов. В квантовой точке движение экситона ограничено ее размерами. В этих условиях представляется полезным введение концепции экситонного композита [52] – среды из КТ. В отличие от обычных композитов экситонный композит образован резонансными активными включениями (их свойства описываются соотношением (11)), что и определяет особенности его электромагнитного отклика. При этом большая часть стандартных процедур пространственного усреднения, принятых в теории эффективной среды, остаются применимыми к экситонным композитам. Такой подход позволяет развить электродинамику слоистых гетероструктур с квантовыми точками на основе хорошо известных методов описания квантовых ям [50, 55].

11. Дисперсия фотонных состояний в экситонных композитах – новый тип оптической дисперсии

Дисперсия света является одним из важнейших эффектов взаимодействия света с веществом. Классический пример – частотная дисперсия: показатель преломления света зависит от частоты. В процессе распространения изменяется частотный спектр света. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой интегральный оператор во времени. Другой пример – пространственная дисперсия [14]: показатель преломления среды зависит от направления распространения света. В процессе распространения трансформируется пространственная структура волнового пучка. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой интегральный оператор в пространстве. Как один из типов дисперсии может рассматриваться анизотропия: показатель преломления зависит от поляризации света. В процессе распространения трансформируется поля-

ризационная структура света; диэлектрическая проницаемость представляет собой тензор.

В работе [65] предсказан новый тип оптической дисперсии, имеющий место в наноструктурных композитных средах (экситонных композитах) для квантового света. Показатель преломления такого света зависит от квантовой статистики света. При распространении света в данной среде квантовая статистика света трансформируется. Диэлектрическая проницаемость среды представляет собой оператор в пространстве фотонных состояний.

Экситонный композит [52] представляет собой упорядоченную систему квантовых точек с пространственно локализованными экситонами. Показатель преломления n произвольного поля в произвольной среде определяется через амплитуду рассеяния на нулевой угол $f(0)$ для одиночного рассеивателя как

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi\rho}{k^2} f(0), \quad (15)$$

где $k = \omega/c$ – волновое число, ρ – пространственная плотность рассеивателей (в нашем случае КТ). Таким образом, ключевой проблемой в определении показателя преломления является анализ взаимодействия поля с одиночным рассеивателем (применительно к экситонному композиту с КТ). При этом определяющую роль играет эффект локального поля. Данная задача детально рассмотрена в ряде работ [61, 65]. Краткие комментарии по этому поводу даны в разд. 9.

Согласно [65], амплитуда рассеяния на нулевой угол является оператором в пространстве квантовых состояний света и имеет в одномодовом случае вид

$$\hat{f}(0) = 2\langle\hat{a}\rangle[f_1(0) - f_2(0)]\hat{\xi} + f_2(0), \quad (16)$$

где $f_{1,2}(0) = -k^2|\mu_0|^2 / \hbar V_{\text{QD}}(\omega - \omega_{1,2} + i0)$ – парциальные амплитуды рассеяния, $\omega_1 = \omega_0 + \Delta\omega$ и $\omega_2 = \omega_0$ – частоты, соответствующие смещенной и несмещенной линии резонансного дуплета (см. рис. 16), $\langle a \rangle$ – среднее значение оператора уничтожения фотона, $\hat{\xi}$ – оператор, имеющий вид

$$\xi = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{|2m+1\rangle\langle 2m|}{\sqrt{2m+1}}. \quad (17)$$

Показатель преломления определяется равенством (15), но с учетом (16), показатель преломления становится фотонным оператором.

Материальное уравнение экситонного композита для операторов электромагнитного поля имеет вид

$$\hat{\mathbf{D}} = \frac{1}{2}(\hat{\varepsilon}\hat{\mathbf{E}} + \hat{\mathbf{E}}\hat{\varepsilon}), \quad (18)$$

где $\hat{\varepsilon} = \hat{n}^2$ – диэлектрическая проницаемость. Материальное уравнение (18) кардинально отличается от обычных случаев квантовой оптики сплошных сред [23]: оно не совпадает по виду с соответствующим уравнением для средних значений. Оператор $\hat{\varepsilon}$ не коммутирует с оператором напряженности и неэрмитов

даже при отсутствии диссипации (сказанное не является физическим противоречием, т. к. диэлектрическая проницаемость не является наблюдаемой величиной). Легко видеть, что все отмеченные свойства операторной диэлектрической проницаемости обусловлены тонкой структурой электродинамического отклика КТ: при $\Delta\omega \rightarrow 0$ $\hat{\epsilon}$ переходит в С-число, совпадающее с диэлектрической проницаемостью среды из независимых двухуровневых осцилляторов.

Простейшей задачей квантовой оптики экситонного композита является распространение плоских волн. Анализ их основывается на решении уравнений Максвелла для безграничной однородной среды с материальным уравнением (18) [65]. Одномодовое поле имеет вид обобщенной плоской волны

$$\hat{\mathbf{E}} = i\sqrt{\frac{\hbar k}{A}} \mathbf{e} \left[\frac{e^{ikn_1 z}}{\sqrt{n_1}} \langle \hat{a} \rangle + \frac{e^{ikn_2 z}}{\sqrt{n_2}} (\hat{a} - \langle \hat{a} \rangle) \right], \quad (19)$$

где $\mathbf{e}$ – единичный вектор поляризации, $n_{1,2}^2 = 1 + 4\pi\rho f_{1,2}(0)/2$ (и аналогичное выражение для $\mathbf{H}$). Первое слагаемое соответствует когерентной части поля, второе – некогерентной. Их показатели преломления $n_{1,2}$ различны, что и определяет трансформацию квантовой статистики поля.

Представленный эффект может наблюдаться в различных физических условиях. Так, при наклонном падении света на границу экситонного композита с вакуумом в последнем возникает двулучепреломление новой физической природы (пространственное расщепление света на когерентную и некогерентную части). При заполнении экситонным композитом микрорезонатора каждая его мода будет характеризоваться двумя резонансными частотами (для когерентной и некогерентной части соответственно). В фотонных кристаллах на основе экситонных композитов полосы непрозрачности для когерентного и некогерентного света будут сдвинуты друг относительно друга. Описанный эффект может иметь существенные приложения в квантовой метрологии, оптической информатике, квантовом компьютеринге.

12. КТ в гармоническом электромагнитном поле.

Режим сильной связи

При взаимодействии двухуровневой системы с сильным резонансным электромагнитным полем $E(t)$, то есть при условии $\Omega_R = \mu E(t)/\hbar > \Gamma_0$, возникает эффект Раби осцилляций [23] – населенность ее уровней осциллирует с частотой Ω_R , называемой частотой Раби; Γ_0 – ширина линии спонтанного распада рассматриваемой системы. В стандартной модели [23] осцилляции Раби являются гармоническими. Учет локальных полей меняет гамильтониан взаимодействия КТ со светом (см. формулу (14)), что приводит к изменению эффекта Раби. Анализ системы уравнений Блоха, соответствующей гамильтониану (14), для режима сильной связи выполнен в [56]. Расчеты демонстрируют существенный ангармонизм Раби-осцилляций и возникновение двух режимов проявления эффекта при $\xi = \Omega_R/\Delta\omega < 1/2$ и при $\xi > 1/2$ с абсолютно различными колебатель-

ными характеристиками (сравните рис. 17, б и в). Здесь $\Delta\omega$ – деполяризационный сдвиг. При $\xi = \xi^{cr} = 0.5$ в динамике осцилляций возникает *бифуркация*, которая разделяет два колебательных режима. Для наблюдения режима бифуркации $\xi^{cr} = 0.5$ приведенная выше оценка деполяризационного сдвига $\hbar\Delta\omega \approx 1$ мэВ диктует условие $\hbar\Omega_R \approx 0.5$ мэВ. Данная величина является достижимой в 2-импульсных экспериментах для КТ. На рис. 17 отображены результаты расчета инверсности (т. е. разности населенностей верхнего и нижнего уровней в КТ) для различных значений параметра ξ .

Отметим, что период осцилляций для идеальной 2-уровневой системы не зависит от напряженности внешнего поля. Однако при наличии локальных полей период осцилляций Раби в КТ (в единицах T) определяется следующим выражением [56]:

$$T_0 = \frac{2}{\pi} \begin{cases} \xi K(2\xi); & \xi < 0.5 \\ K(1/2\xi); & \xi > 0.5 \end{cases}, \quad (20)$$

где $K(\dots)$ – эллиптический интеграл первого рода. Данный результат экспериментально подтвержден в работе [88]. Эффект Раби осцилляций, модифицированный влиянием локальных полей, может служить физической основой создания логических элементов квантовой информатики.

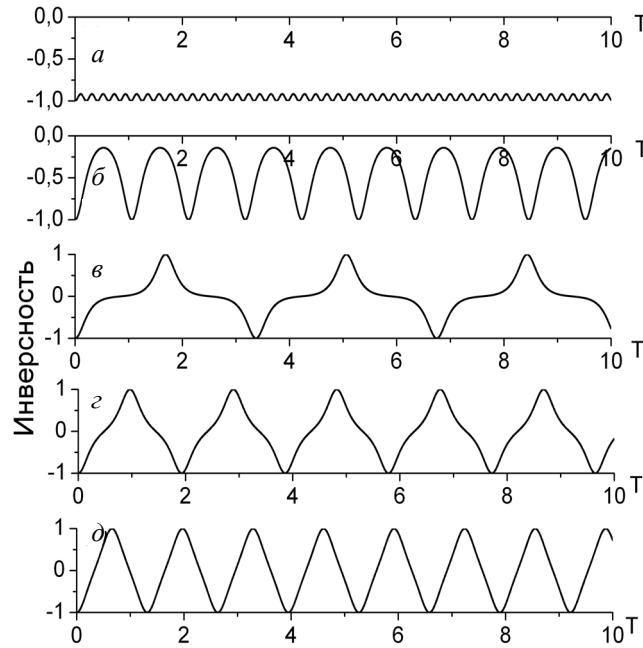


Рис. 17. Осцилляции инверсности в КТ с учетом влияния локальных полей [56]:

а – $\xi = 0.2$; б – $\xi = 0.495$; в – $\xi = 0.5001$; г – $\xi = 0.51$; д – $\xi = 0.6$.

$T = \Omega_R t / 2\pi$. При $\xi > 1$ поведение инверсности удовлетворяет приближению $w(t) = \cos(2\pi T)$, которое описывает стандартную картину осцилляций Раби [23]

Выше нами рассмотрена полуклассическая теория осцилляций Раби, в которой поле описывалось уравнениями классической электродинамики, а КТ рассматривалась как квантовая система. Таким образом, поле представляло обычную монохроматическую волну и в нем не учитывалось фотонная природа света. Для описания ряда экспериментов применение данной теории вполне допустимо. Однако в последнее время прогресс в экспериментальной квантовой оптике позволил создавать квантовые состояния электромагнитного поля, имеющие определенное распределение фотонов, таких как фоксовские состояния, кубиты, когерентные поля и др., и использовать их в спектроскопии одиночных КТ. Далее в этом разделе мы рассмотрим нелинейную динамику взаимодействия КТ с подобными полями. В качестве примера рассмотрим когерентное состояние поля.

Пусть экситон в КТ, находящийся в момент $t = 0$ в основном состоянии, взаимодействует с когерентным полем, функция распределения фотонов которого имеет вид: $\exp[-\langle n \rangle / 2] \langle n \rangle^{n/2} / \sqrt{n!}$ – где $\langle n \rangle$ – среднее число фотонов. Полная система уравнений, описывающая процесс взаимодействия системы с данным излучением, приведена в [61]. Как и ранее, введем безразмерный параметр $\xi = \Omega_{\langle n \rangle} / \Delta \omega$, в котором $\Omega_{\langle n \rangle} = 2g\sqrt{\langle n \rangle}$ – квантовая частота Раби, g – постоянная взаимодействия с внешним полем. На рис. 18 отображены результаты вычислений инверсности как функции безразмерного времени $\tau = gt$ для $\langle n(0) \rangle = 9.0$ и различных значений ξ .

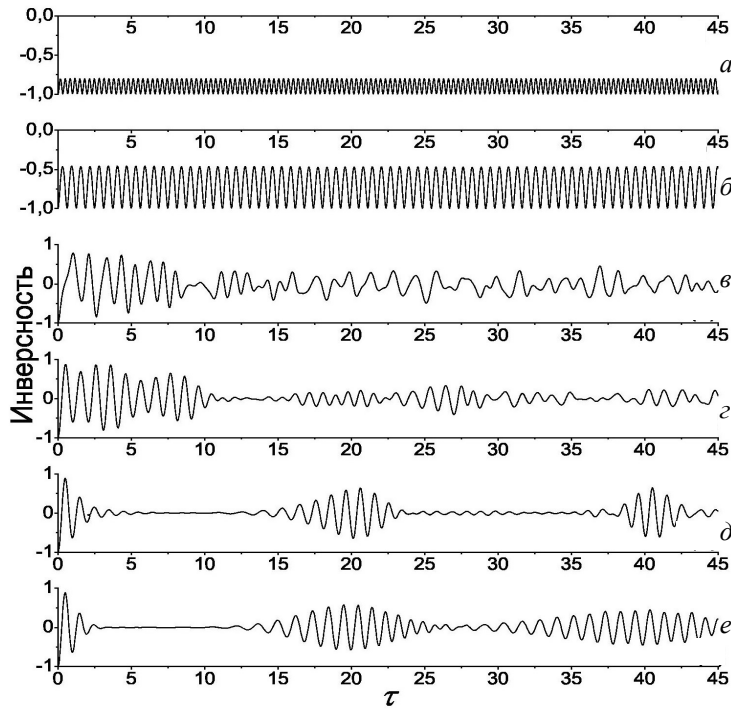


Рис. 18. Временная зависимость инверсности КТ, взаимодействующей с когерентным полем: а – $\xi = 0.2$; б – 0.49 ; в – 0.53 ; г – 1.2 ; д – $\xi = 3.5$; е – $\xi = 18.0$

Известно, что картина ОР в идеальной атомной системе (при отсутствии локального поля и релаксационных процессов), взаимодействующей с одноимовым когерентным полем, не зависит от параметра g [23]. При этом во временной эволюции инверсности возникают области коллапса и спонтанных возрождений населенностей [23]. Численное решение (3) показывает, что при $\xi \geq 18$ поведение ОР аналогично случаю отсутствия локального поля ($\xi \rightarrow \infty$ при $\Delta\omega \rightarrow 0$), как показано на рис. 18, *е*. В зависимости от ξ , в ОР возникают два различных режима колебаний. Первый из них проявляется при $\xi < 0.5$. При этом инверсность системы – отрицательна (рис. 18, *а, б*). Во втором режиме, возникающем при $\xi > 0.5$, инверсность колеблется в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq 1$ (рис. 18, *в–е*). Данные два режима разделены точкой бифуркации, возникающей, как и в предыдущем разделе, при $\xi_b = 0.5$ (сравните рис. 18, *б* и *в*). В окрестности точки бифуркации поведение Раби осцилляций является хаотическим (рис. 18, *в, г*) и значительно отличается от явления коллапса – возрождений представленного на рис. 18, *е*. Как нами показано, данный результат указывает на изменение состояния квантового поля и является следствием нового типа дисперсии – дисперсии фотонной статистики света [65].

13. Заключение

Мы сделали краткий обзор недавних результатов, полученных в лаборатории электродинамики НИИ ЯП БГУ, по исследованию и теоретическому моделированию электромагнитных эффектов в наноструктурах. Не останавливаясь на деталях анализа, мы постарались представить основные физические эффекты, возникающие при взаимодействии света с теми или иными наноразмерными объектами и определяемые именно масштабом этих объектов. Но, пожалуй, главная цель данной работы – продемонстрировать, как теоретические модели приводят к идеям, базовым для разработки элементного состава будущей нанооптики, квантовой информатики и т. п. Следует подчеркнуть, что методология исследования, развитая в наших работах и представленная в настоящей статье, не ограничивается в своей применимости углеродными нанотрубками и квантовыми точками. Напротив, эта методология, адаптирующая методы классической электродинамики к наноразмерным системам, с самого начала разрабатывалась как общая идеологическая платформа решения широкого класса задач. К настоящему моменту сделаны только первые шаги. Мы уверены, что развиваемая методология приведет в будущем к новым важным научным результатам.

Авторы выражают благодарность сотрудникам НИИ ЯП В. Н. Родионовой и В. А. Карповичу за проведение экспериментов по изучению электромагнитного отклика композитов на основе УЛФ. За предоставление образцов и многочисленные дискуссии авторы признательны нашим партнерам из Института катализа и Института неорганической химии СО РАН В. Кузнецову и А. Окотрубу, из Международного технологического центра (Рэлей, США) О. Шендеровой, из университета г. Намюра (Бельгия) профессору Ф. Ламбину и доктору Р. Лангет. Авторы благодарят своих постоянных соавторов профессора А. Лахтакия (Пен-

ильванский университет, США) и доктора А. Хоффмана (Технический университет Берлина) за многолетнее плодотворное сотрудничество, без которого представленные результаты были бы невозможны. Авторы выражают также признательность всем своим соавторам не упомянутым выше. Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проекты Ф05-127, Ф05К-003, Ф06Р-091, Ф06Р-101), Государственного комитета по науке и технологиям РБ и ИНТАС (проект 03-50-4409), ИНТАС (проекты 05-1000008-7801 и 06-1000013-9225) и программы Наука ради мира научного комитета НАТО (проект SfP-981051).

Литература

1. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. Science of fullerenes and carbon nanotubes. 1996.
2. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris Ph. Carbon nanotubes. 2001.
3. Gamota D. R., Brazis P. et al. (Eds.) Printed organic and molecular electronics. 2004.
4. Kelly M. J. Low-dimensional semiconductors: materials, physics, technology, devices. 1995.
5. Gaponenko S. V. Optical Properties of semiconductor nanocrystals. 1998.
6. Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N. Quantum dot heterostructures. 1999.
7. Smith B. W., Monthieux M., Luzzi D. E. // Nature. 1998. Vol. 396, № 6709. P. 323.
8. Hirahara K., Suenaga K. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85, № 25. P. 5384.
9. Кулин С. Я. // УФН. 1999. Т. 169, № 5. С. 507.
10. Yamamoto Y., Tassone F., Cao H. Semiconductor cavity quantum electrodynamics. 2000.
11. Michler P. (Ed.) Single quantum dots, Topics of applied physics. 2003.
12. Zwiller V., Aichele T., Benson O. // New J. Phys. 2004. Vol. 6. P. 96(23).
13. Lounis B., Orrit M. // Rep. Prog. Phys. 2005. Vol. 68, № 5. P. 1129.
14. Агранович В. М., Гинзбург В. Л., Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. 1979.
15. Вайнштейн Л. А. Электромагнитные волны. 1988.
16. Басс Ф. Г., Фукс И. М., Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. 1972
17. Вайнштейн Л. А. Открытые резонаторы и открытые волноводы. 1966.
18. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов. 1984.
19. Шевченко В. В. Плавные переходы в открытых волноводах. 1969.
20. Нефедов Е. И., Фиалковский А. Т. Полосковые линии передачи. 1980.
21. Ilyinsky A. S., Slepyan G. Ya., Slepyan A. Ya. Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
22. Басс Ф. Г., Булгаков А. А., Тетервов А. П. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. 1989.
23. Scully M. O., Zubairy M. S. Quantum optics. 2001.
24. Барышевский В. Г. Ядерная оптика поляризованных сред. М., 1995.
25. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. 9485.
26. Lakhtakia A., Slepyan G. Ya. et al. // Carbon. 1998. Vol. 36. P. 1833.
27. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.
28. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Electromagnetic fields in unconventional structures and materials. 2000. P. 217.
29. Slepyan G. Ya., Krapivin N. A. et al. // AEÜ Int. J. Electron. & Commun. 2001. Vol. 55. P. 273.
30. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Synth. Metals. 2001. Vol. 124. P. 121.
31. Максименко С. А., Слепян Г. Я. // Радиотехника и электроника. 2002. Т. 47. С. 261.
32. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Introduction to complex mediums for optics and electromagnetics. 2003. Vol. PM 123. P. 507.

33. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Proc. joint 9th Intern. Conf. on Electromagnetics in Advanced Applications ICEAA '05 and 11th European Electromagnetic Structures Conf. EESC '05. 2005. P. 949.
34. Slepyan G. Ya., Shuba M. V. et al. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, № 19. P. 195416 (11).
35. Maksimenko S.A., Slepyan G. Ya. et al. // Proc. SPIE 2006. Vol. 6328. P. 632807 (8).
36. Batrakov K. G., Kuzhir P. P., Maksimenko S. A. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328 "Nanomodeling II". P. 63280Z (8).
37. Maksimenko S. A., Khrushchinsky A. A. et al. // J. Nanophotonics. 2007. Vol. 1. P. 013505(14).
38. Kuzhir P. P., Batrakov K. G., Maksimenko S. A. // Synthesis and Reactivity in Inorganic and Metal-Organic Chemistry. 2007. Vol. 37. P. 341
39. Yevtushenko O. M., Slepyan G. Ya. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79. P. 1102.
40. Maksimenko A. S., Slepyan G. Ya. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. P. 362.
41. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 61. P. R777.
42. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 053808(10).
43. Stanciu C., Ehlich R., Petrov V. et al. // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 81. P. 4064.
44. Slepyan G. Ya., Khrutchinski A. A. et al. // Int. J. of Nanoscience. 2004. Vol. 3. P. 343.
45. Nemilentsau A. M., Slepyan G. Ya. et al. // Carbon. 2006. Vol. 44, № 9. P. 2246.
46. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 1275.
47. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // J. Electronic Materials. 2000. Vol. 29. P. 494.
48. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // Semiconductor Sci. and Techn. 2000. Vol. 15. P. 491.
49. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // Mater. Sci. & Eng. B. 2001. Vol. 82. P. 215.
50. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. P. 125326 (8).
51. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. et al. // Phys. Stat. Sol. (a). 2002. Vol. 190. P. 555.
52. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Advances in Electromagnetics of Complex Media and Metamaterials, NATO Sci. Ser.: II: Mathematics, Physics and Chemistry: Vol. 89. 2003. P. 385.
53. Bondarev I. V., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 073310(4).
54. Bondarev I. V., Maksimenko S. A. et al. // Material Sci. Eng. C. 2003. Vol. 23. P. 1107.
55. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. 2004. P. 3097.
56. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 045320(5).
57. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Superlattices and Microstructures. 2004. Vol. 36. P. 773.
58. Slepyan G. Ya., Magyarov A. et al. // Phys. Stat. Sol. (c). 2005. Vol. 2. P. 850.
59. Sreenivasan D., Haverkort J. E. M. et al. // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6328 "Nanomodeling II". P. 63280T (9).
60. Bondarev I. V., Slepyan G. Ya., Maksimenko S.A. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 115504(4).
61. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063804(17).
62. Бондарев И. В., Слепян Г. Я., Максименко С. А. // Опт. и Спектроск., 2003. Т. 94. С. 885.
63. Bondarev I. V., Slepyan G. Ya. et al. // Carbon. 2004. Vol. 42. P. 997.
64. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // The Handbook of Nanotechnology: Nanometer Structure Theory, Modeling, and Simulation. 2004. P. 145.
65. Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya. // arXiv.org:quant-ph/0605189. 2006.
66. Maksimenko S. A., Rodionova V. N. et al. // Diamond and Related Materials. 2007. Vol. 16. P. 1231.
67. Langlet R., Geuquet N. et al. // Diamond and Related Materials. 2007. ol. 16. P. 2145.
68. Kazunori A., Chikara M. et al. // US Patent WO03083993 (10 September 2003).
69. Burke P.J., Li S., Yu Z. // IEEE Trans. Nanotechn. 2006. Vol. 5. 314; arXiv.org:cond-mat/0408418. 2004).
70. Wang Y., Kempa K. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. P. 2607.
71. Dresselhaus M. S. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 959.
72. Murakami Y., Einarsson E. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 087402(4).
73. Hanson G. W. // IEEE Trans. Antenn. Propagat. 2005. Vol. 53. P. 3426.
74. Леонтович М. А., Левин М. Л. // ЖТФ. 1944. Т. 14. С. 481.

75. Jeon T.-I., Kim K. J. et al. // APL. 2002. Vol. 80. P. 3403.
76. Bommeli F., Degiorgi L. et al. // Synth. Metals. 1997. Vol. 86. P. 2307.
77. Ugawa A., Rinzler A.G., Tanner D. B. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. R11305.
78. Laroche M., Carminati R., Greffet J.-J. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P.123903.
79. Kuznetsov V. L., Chuvilin A. L. et al. // Chem. Phys. Lett. 1994. Vol. 222. P. 343.
80. Kuznetsov V.L., Butenko Yu.V. // Synthesis and applications of ultrananocrystalline diamond. 2005. P. 199.
81. Berger C. J., Yi Y., Wang Z. L., de Heer W. A. // Appl. Phys. A. 2002. Vol. 74. P. 363.
82. Zvelto O. Principles of lasers. 2004.
83. Collins Ph., Avouris, P. // Scientific American. 2000. P. 68.
84. Chen J., Perebeinos V. et al. // Science. 2006. Vol. 310. P. 1171.
85. Кубиц О. В., Портной М. Е. // Письма в ЖТФ. 2005, Т. 31, вып.15. С. 85.
86. Margulis V. A., Sizikova T. A. // Physica B. 1998. Vol. 245. P. 173.
87. Lauret J. S., Voisin C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. P. 057404(4).
88. Lauret J. S., Voisin C. et al. // Physica E. 2003. Vol. 17. P. 380.
89. Mitsumori Y., Hasegawa A. et al. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 233305(6).

ELECTROMAGNETIC WAVES IN NANOSTRUCTURES

**S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan, K. G. Batrakov, P. P. Kuzhir,
A. V. Magyarov, A. M. Nemilentsau, A. A. Khrutchinski, M. V. Shuba**

A research discipline – nanoelectromagnetics – is introduced as a synthesis of macroscopic electrodynamics and microscopic theory of electronic properties of different nanostructures exemplified by carbon nanotubes (CNTs) and quantum dots (QDs). The method of effective boundary conditions is shown to be a universal tool for the study of electrodynamic problems of nanotubes. A set of physical effects, which emerge from the interaction of light with different nanocarbon structures and QDs and which are due to characteristic sizes of objects, are presented. Linear electrodynamics of nanotubes, nonlinear optical effects in nanotubes and foundations of quantum electrodynamics in nanotubes are discussed. A strong slowing down of surface waves in nanotubes is demonstrated and the concept of nanotube as a surface wave nanowaveguide in the infrared and terahertz range is presented. Antenna properties of CNTs and CNT bundles are described and the thermal radiation of isolated CNT is demonstrated to be strongly different from the black-body radiation. The idea of the CNT as monomolecular analog of free electron laser is proposed and discussed. The high-efficient generation of high-order harmonics in nanotubes exposed to strong pumping field is predicted. Experimental results on third-order harmonic generation in nanotube ensemble is compared with theoretical predictions. The formalism of electrodynamics of lossy dispersive media is applied to the problem of spontaneous radiation of an excited atom in the carbon nanotube. A theory is presented of the local field impact on the QD electromagnetic response in the weak and strong light-matter coupling regimes. Potentiality of logic elements development for the quantum information processing on the basis of quantum dots in the strong light-matter coupling regime is discussed. First results on measurements of the attenuation of electromagnetic waves in onion-like carbon (OLC) – based polymer films on a substrate are reported in the frequency range 27–38 GHz. The measurements demonstrate potentiality of OLC-based composites as basic components for wideband electromagnetic wave absorbing materials.

КВАНТОВО-ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В АТОМНО-ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

И. В. Бондарев*

Углеродная нанотрубка (УН) представляет собой графеновый лист, свернутый в цилиндр диаметром порядка 1 нм и длиной до нескольких сантиметров, таким образом образуя практически идеально-одномерную полую углеродную нить. Обширные исследования, выполненные за последние годы в различных лабораториях по всему миру, выявили исключительную уникальность физических свойств УН, обусловленную прежде всего эффектом поперечного конфинмента и соответственно поперечного размерного квантования электронного движения в этих системах [1, 2]. Уникальность физических свойств УН открывает пути для их потенциального использования в многочисленных приложениях, например, при создании миниатюрных, микроскопически малого размера, электронных, оптических, механических, электромеханических, сенсорных устройств, а также в качестве соответствующих компонент для макроскопических композитных материалов с новыми свойствами [3].

Физические свойства УН могут быть контролируемым образом модифицированы путем их допирования примесными атомами, молекулами, молекулярными соединениями [4]. Экспериментально продемонстрирована, в частности, возможность инкапсуляции единичных атомов (ионов) внутрь одностенных нанотрубок [5] и их интеркалирования в межнанотрубочное пространство [4, 6]. Несомненно, что и свойства атомов-допантов меняются при их внедрении в УН. Это, а также прогресс в технологиях выращивания сверхдлинных (до нескольких сантиметров [7, 8]) нанотрубок малых диаметров (~1 нм), стимулирует исследования квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных нанотрубках, таких, например, как динамика спонтанного распада, перепутывание возбужденных атомных состояний в присутствии УН, оптическое поглощение атомно-допированными УН, ван-дер-ваальсовы взаимодействия атомов с нанотрубкой и др. Такие исследования важны как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения, поскольку проливают свет на особенности электромагнитных взаимодействий в низкоразмерных диспергирующих и поглощающих средах и тем самым ведут к выработке новых решений по применению атомно-допированных УН в нанопотонике и квантовых информационных технологиях.

Отметим, что несмотря на впечатляющие эксперименты по наблюдению фундаментальных высококогерентных квантовых эффектов в разнообразных твердотельных мезоскопических системах, таких, например, как квантовые точки в полупроводниковых микрорезонаторах и фотонных кристаллах, ядерные спины в решетке, джозефсоновские переходы и др., экспериментальные исследования по созданию твердотельных наноструктурированных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний (для их последующего применения в нанопотонике и квантовых информационных технологиях) по-прежнему находятся на стадии проверки правильности и тестиро-

* North Carolina Central University, USA.

вания теоретических гипотез (см., например, обзор [9]). Разработка наноструктурированных твердотельных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний – критически важная научная проблема на ближайшие десятилетия. Необходимо создать материалы с характерными временами когерентности парных квазичастичных корреляций, по крайней мере, на 3–4 порядка величины превышающими время одного акта парного взаимодействия [10, 11]. Тогда парная корреляция будет хорошо определенным перепутанным двухчастичным состоянием соответственно, обеспечивая возможность распространения квантовой информации на расстояние, определяемое числом одновременно скоррелированных пар.

Учитывая важность проблемы для квантовых информационных технологий, необходимо развивать различные альтернативные подходы к созданию наноструктурированных материалов с высокой степенью когерентности квантовых квазичастичных состояний. В данной работе дается краткий обзор теоретических результатов, полученных недавно для одного из таких подходов, основанного на применении углеродных нанотрубок, допированных единичными атомами (ионами). О перспективности применения атомно-допированных УН в нанофотонике и квантовых информационных технологиях впервые было указано в работах [12, 13]. Дальнейшие исследования ван-дер-ваальсовых взаимодействий атомов с УН [14–16], оптического поглощения атомно-допированными УН вблизи частот атомных переходов [17, 18], и, наконец, перепутывания атомных состояний вблизи УН [19, 20], только подтвердили обоснованность первоначальной идеи. Здесь дается лишь краткий теоретический обзор упомянутых выше основных квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных углеродных нанотрубках. Более детальный анализ можно найти в оригинальных работах [12–23].

1. Общий формализм

Для корректного рассмотрения квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных углеродных нанотрубках необходимо разработать процедуру квантования электромагнитного поля в присутствии квазиодномерной диспергирующей и поглощающей среды, каковой является сама УН. Проблема состоит в том, что при наличии поглощения операторные уравнения Максвелла становятся неэрмитовыми, и соответственно разложение их решений по ортогональным модам, обычно применяемое в стандартной квантовой электродинамике (см., например, [24]), становится, строго говоря, плохо определенным в математическом смысле. В связи с этим в работах [25, 26] был предложен другой подход к решению задачи о квантовании электромагнитного поля в диспергирующих и поглощающих средах, и этот подход был позднее применен к квазиодномерным поглощающим средам, в частности, к атомно-допированным УН [13, 16, 20]. Идея метода состоит в том, что Фурье-образы электрического и магнитного полей рассматриваются в качестве физических наблюдаемых соответ-

ствующих квантово-механических операторов в представлении Шредингера. Последние удовлетворяют уравнениям Максвелла в Фурье-пространстве с дополнительным операторным источником (т. н. шумовой ток [25]), ответственным за выполнение стандартных квантово-электродинамических коммутационных соотношений для операторов электрического и магнитного полей в присутствии поглощающей и диспергирующей среды. Операторный источник представляется в виде надлежащим образом подобранных вторично квантованных Бозе-операторов, имеющих смысл операторов рождения и уничтожения одно-квантовых возбуждений фотонного типа в среде. В итоге Фурье-образы операторов электрического и магнитного полей представляются в виде интегралов-сверток вторично квантованных Бозе-операторов с тензором Грина электромагнитного поля. Последний определяется геометрией системы и находится решением уравнения Грина при наложенных на поверхностях раздела сред граничных условиях и условии затухания на бесконечности.

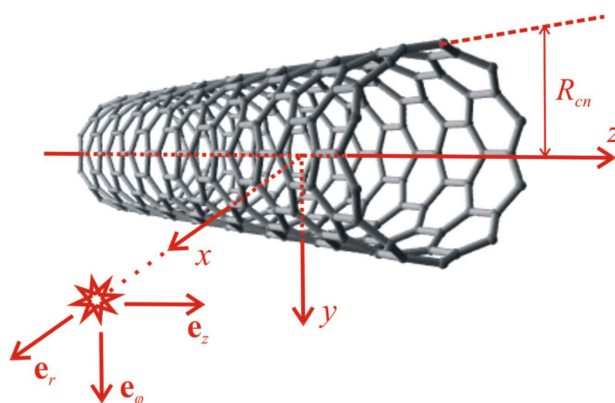


Рис. 1. Геометрия задачи при рассмотрении квантово-электродинамических эффектов в атомно-допированных УН (атом может находиться как снаружи, так и внутри нанотрубки)

Ниже дается краткое описание общего формализма при рассмотрении квантово-электродинамических задач для атомно-допированных УН с учетом эффектов поглощения и дисперсии электромагнитного поля. Изначально рассматривается бесконечно длинная одностенная УН и нейтральная атомная система (атом или молекула) с радиус-вектором центра масс $\mathbf{r}_A$ вблизи УН (рис.1). С учетом цилиндрической симметрии задачи выбирается ортонормированный цилиндрический базис $\{\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z\}$ с вектором $\mathbf{e}_z$, направленным вдоль оси УН, так что $\mathbf{r}_A = r_A \mathbf{e}_r = \{r_A, 0, 0\}$. Наличие сильной поперечной деполяризации позволяет пренебречь возможной модификацией радиальной ε_{zz} и азимутальной $\varepsilon_{\varphi\varphi}$ составляющих тензора диэлектрической проницаемости среды в присутствии УН [27]. При этом единственная отличная от единицы компонента ε_{zz} определяется продольной поляризуемостью нанотрубки и отвечает за продольный поверхно-

стный ток параллельно вектору $\mathbf{e}_z$. Тогда соответствующий (шумовой) операторный токовый источник имеет вид

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega) = \sqrt{\hbar \omega \operatorname{Re} \sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega) / \pi} \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) \mathbf{e}_z,$$

где $\mathbf{R} = \{R_{cn}, \phi, Z\}$ – радиус-вектор произвольной точки поверхности УН, $\hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$ – вторично квантованный скалярный Бозе-оператор, уничтожающий одноквантовое возбуждение фотонного типа частоты ω на поверхности УН (оператор $\hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega)$ рождает аналогичное возбуждение на поверхности УН), $\sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$ – аксиальная поверхностная проводимость на единицу длины УН (получается из $\varepsilon_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$ посредством формулы Друде). Операторы $\hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$ и $\hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega)$ удовлетворяют стандартным бозонным коммутационным соотношениям на поверхности УН.

Полный (нерелятивистский) гамильтониан атомной подсистемы, взаимодействующей с модифицированным присутствием УН электромагнитным полем, имеет стандартный вид (используется гауссова система единиц):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + \sum_i \frac{1}{2m_i} \left[\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q_i}{c} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{r}}_i + \hat{\mathbf{r}}_i) \right]^2 \\ & + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\rho}_A(\mathbf{r}) \hat{\phi}_A(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \hat{\rho}_A(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Здесь m_i , q_i , $\hat{\mathbf{r}}_i$ и $\hat{\mathbf{p}}_i$ – соответственно, массы, заряды, операторы координат (относительно $\mathbf{r}_A$) и импульсов частиц в атомной подсистеме. Первый член есть вторично квантованный оператор свободного электромагнитного поля, модифицированного присутствием УН. Второй и третий члены определяют кинетическую и потенциальную (кулоновскую) энергии атомной подсистемы. Здесь $\hat{\phi}_A(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \hat{\rho}_A(\mathbf{r}') / |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ – скалярный потенциал заряженных частиц, распределенных в атомной подсистеме с плотностью $\hat{\rho}_A(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A - \hat{\mathbf{r}}_i)$. Последний член гамильтониана учитывает кулоновское взаимодействие частиц с УН. Шредингеровские операторы векторного и скалярного потенциалов определяются для произвольного $\mathbf{r} = \{r, \varphi, z\}$ в виде

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty d\omega (c / i\omega) \hat{\mathbf{E}}^\perp(\mathbf{r}, \omega) + \text{h.c.}, \\ -\nabla \hat{\phi}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty d\omega \hat{\mathbf{E}}^\parallel(\mathbf{r}, \omega) + \text{h.c.}, \end{aligned}$$

соответственно

$$\hat{\mathbf{E}}^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \delta^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega)$$

есть оператор поперечного (продольного) электрического поля, $\delta_{\alpha\beta}^\perp(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}) - \delta_{\alpha\beta}^\parallel(\mathbf{r})$ и $\delta_{\alpha\beta}^\parallel(\mathbf{r}) = -\nabla_\alpha \nabla_\beta (1/4\pi r)$ – поперечная и продольная дельта-функции.

Фурье-образы $\hat{\mathbf{E}}$ и $\hat{\mathbf{H}} = (i\omega / c)^{-1} \nabla \times \hat{\mathbf{E}}$ удовлетворяют уравнениям Максвелла:

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i(\omega / c) \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, \omega) = -i(\omega / c) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) + (4\pi / c) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega),$$

где $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{R} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega) = 2\hat{\mathbf{J}}(R_{cn}, \varphi, z, \omega) \delta(r - R_{cn})$ – оператор плотности шумового тока на поверхности УН. Из уравнений Максвелла имеем электрический Фурье-образ в виде

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i(4\pi\omega / c^2) \int d\mathbf{R} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \omega) \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}, \omega),$$

где $\mathbf{G}$ – тензор Грина электромагнитного поля в окрестности УН, удовлетворяющий уравнению

$$\sum_{\alpha=r, \varphi, z} [\nabla \times \nabla \times - (\omega / c)^2]_{z\alpha} G_{\alpha z}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

при наложенных на поверхности УН граничных условиях (они вытекают из условий непрерывности и наличия скачка для соответствующих компонент электромагнитного поля – см., например, [28]) и условия затухания на бесконечности. Последнее уравнение фактически замыкает формализм квантования электромагнитного поля в присутствии квазиодномерной поглощающей и диспергирующей среды. В нашем случае роль среды играет УН, но это не ограничивает общности изложенного подхода, который, возможно с небольшими модификациями, остается верным в применении к любым квазиодномерным поглощающим и диспергирующим средам. При этом операторы электрического и магнитного полей удовлетворяют всем необходимым требованиям стандартной квантовой электродинамики [25, 26]. Таким образом, задача о квантовании электромагнитного поля вблизи УН фактически сводится к определению тензора Грина электромагнитного поля для связанной системы «Атом – УН». В нем (а точнее, в налагаемых на него граничных условиях, куда входит поверхностная проводимость нанотрубки $\sigma_{zz}(\mathbf{R}, \omega)$) содержится вся информация об УН. Проводимость же определяется заранее, исходя из реалистичной зонной структуры нанотрубок конкретных типов.

Предполагая далее, что атомная подсистема хорошо локализована в пространстве, так что применимо длинноволновое приближение по электромагнитному полю, можно разложить операторы векторного и скалярного потенциалов $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ и $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ в изначальном полном гамильтониане в окрестности координаты $\mathbf{r}_A$ центра масс атома и удержать в этих разложениях первые не исчезающие члены. Тогда при условии кулоновской калибровки $[\mathbf{p}_i, \hat{\mathbf{A}}] = 0$ приходим к полному гамильтониану вида (электрическое дипольное приближение):

$$\hat{H} = \hat{H}_F + \hat{H}_A + \hat{H}_{AF}^{(1)} + \hat{H}_{AF}^{(2)},$$

где $\hat{H}_F = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega)$, $\hat{H}_A = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$,

$$\hat{H}_{AF}^{(1)} = -\sum_i \frac{q_i}{m_i c} \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_A) + \hat{\mathbf{d}} \cdot \nabla \hat{\phi}(\mathbf{r}_A), \quad \hat{H}_{AF}^{(2)} = \sum_i \frac{q_i^2}{2m_i c^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_A) \text{ – соответственно}$$

гамильтонианы не взаимодействующих электромагнитного поля (модифицированного присутствием УН) и атомной подсистемы и два вклада в гамильтониан их взаимодействия, происходящие соответственно от линейного и квадратичного по электромагнитным потенциалам членов, $\mathbf{d} = \sum_i q_i \hat{\mathbf{r}}_i$ – оператор электрического дипольного момента атомной подсистемы. Этот гамильтониан, в свою очередь, может быть переписан в стандартном вторично квантованном виде по операторам рождения/уничтожения одноквантовых фотонных возбуждений и в двухуровневом приближении по атомным переменным:

$$\hat{H} = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \int d\mathbf{R} \hat{f}^+(\mathbf{R}, \omega) \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + \frac{\hbar \tilde{\omega}_A}{2} \hat{\sigma}_z + \\ + \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{R} [g^{(+)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega) \hat{\sigma}^\dagger - g^{(-)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega) \hat{\sigma}] \hat{f}(\mathbf{R}, \omega) + h.c.$$

Операторы Паули $\hat{\sigma}_z = |u\rangle\langle u| - |l\rangle\langle l|$, $\hat{\sigma} = |l\rangle\langle u|$ и $\hat{\sigma}^\dagger = |u\rangle\langle l|$ описывают электрические дипольные переходы между двумя атомными состояниями, верхним $|u\rangle$ и нижним $|l\rangle$, разделенными частотой атомного перехода ω_A . Эта («голая», неперенормированная) частота модифицируется взаимодействием $\hat{H}_{AF}^{(2)}$, которое, будучи не зависящим от оператора атомного дипольного момента, не дает вклада в смешивание состояний $|u\rangle$ и $|l\rangle$, но зато перенормирует частоту атомного перехода к виду

$$\tilde{\omega}_A = \omega_A [1 - 2/(\hbar \omega_A)^2 \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{R} |g^\perp(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)|^2].$$

С другой стороны, взаимодействие $\hat{H}_{AF}^{(1)}$ зависит от оператора атомного дипольного момента и потому смешивает состояния $|u\rangle$ и $|l\rangle$, приводя в итоге к стандартному вторично квантованному взаимодействию с матричными элементами вида $g^{(\pm)} = g^\perp \pm (\omega/\omega_A) g^\parallel$, где

$$g^{\perp(\parallel)} = -i(4\omega_A/c^2) \sqrt{\pi \hbar \omega \text{Re} \sigma_{zz}(\omega)} \sum_\alpha d_\alpha G_{\alpha z}^{\perp(\parallel)}, \quad d_\alpha = \langle l | \hat{d}_\alpha | u \rangle$$

– дипольный момент перехода, а $G_{\alpha z}^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)$ – поперечная (продольная) части тензора Грина электромагнитного поля (определяются полностью аналогично приведенным выше определениям операторов поперечного и продольного электрического поля). При этом для функций $g^{\perp(\parallel)}$ имеет место следующее важное свойство:

$$\int d\mathbf{R} |g^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{R}, \omega)|^2 = (\hbar^2/2\pi)(\omega_A/\omega)^2 \Gamma_0(\omega) \xi^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \omega).$$

Здесь интегрирование выполняется по поверхности УН, $\xi^{\perp(\parallel)}(\mathbf{r}_A, \omega)$ – поперечная (продольная) локальная (зависящая от местоположения атома) плотность фотонных состояний вблизи УН (иногда называемая Парсел-фактором [29]), а $\Gamma_0(\omega)$ – хорошо известная функция частотной зависимости скорости спонтанного распада возбужденного атомного состояния в вакууме (см., например, [30, 31]).

Таким образом, полный гамильтониан связанной системы «Атом-УН» (записанный в дипольном приближении по электромагнитному полю и двухуровневом приближении по атомным переменным – стандартные, широко используемые в атомной и лазерной физике приближения) в итоге выражается только через внутренние параметры взаимодействия электромагнитной и атомной подсистем – поперечную и продольную локальные функции фотонных состояний вблизи УН. Последние отвечают за интенсивность процесса обмена фотоном между атомом и УН и должны быть вычислены заранее, исходя из функции Грина электромагнитной подсистемы. Дальнейшее обобщение изложенного формализма на случай любого конечного числа атомов вблизи УН не вызывает затруднений. При этом в теории возникает еще одна пара внутренних параметров взаимодействия – двухчастичные поперечная и продольная локальные функции фотонных состояний [19, 20], задающие интенсивность обмена фотоном между парой атомов вблизи УН. Различные квантово-электродинамические эффекты в атомно-допированных УН могут быть теперь рассмотрены путем решения временного уравнения Шредингера с полученным вторично квантованным гамильтонианом. Ниже рассматриваются конкретные примеры применения изложенной теории.

2. Спонтанный распад возбужденного атома вблизи УН

Хорошо известно, что спонтанный распад возбужденного атома может происходить по-разному в зависимости от силы связи возбужденного атомного состояния с вакуумными электромагнитными модами его локального окружения (см., например, [29, 31, 33]). Последняя определяется величиной (дипольного) матричного элемента перехода и плотностью конечных фотонных состояний, доступных для поглощения окружением испущенного атомом фотона. Принято различать режимы слабой и сильной связи атома с вакуумным электромагнитным полем. Первый характеризуется монотонной экспоненциальной динамикой распада возбужденного атомного уровня, где скорость экспоненциального затухания может варьироваться по сравнению с вакуумной. Второй, напротив, характеризуется сильно неэкспоненциальной осциллирующей динамикой распада (Раби-осцилляции), когда изначально возбужденный атомный уровень периодически обменивается энергией с вакуумным полем.

На основе изложенного выше формализма в работах [12, 13, 20, 22] были получены и решены интегральные уравнения эволюции возбужденного состояния двухуровневого атома вблизи аксиальных УН различных диаметров. Уравнения решались численно и аналитически с использованием Марковского приближения для ядра интегрального уравнения. Типичные основные результаты приведены на рис. 2 для различных расстояний атома от поверхности УН (9,0) и различных частот атомных переходов. Видно, что с приближением атома к поверхности УН экспоненциальная динамика распада сменяется Раби-осцилляциями. Это свидетельствует о том, что на достаточно близких расстояниях (или внутри УН достаточно малого радиуса) концентрация вакуумного поля настолько высока, что реализуется режим сильной связи атома с вакуумными

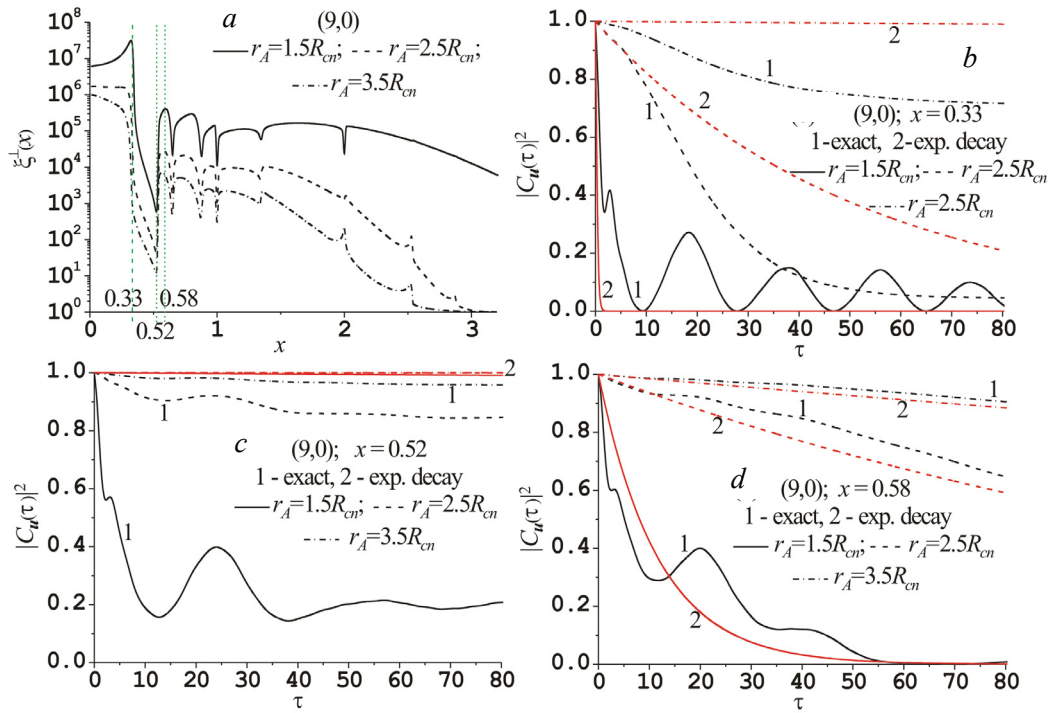


Рис. 2. (a) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома снаружи нанотрубки (9,0) на различных расстояниях от ее стенки. (b), (c), (d) Динамика спонтанного распада заселенности возбужденного атомного состояния, полученная прямым численным решением интегрального уравнения эволюции, на соответствующих расстояниях от стенки УН (9,0) в сравнении с экспоненциальным затуханием, которое получается при использовании в интегральном уравнении Марковского приближения. Расчеты выполнены для трех частот атомных переходов [штриховые линии на рис. 2, a]; x и τ – соответственно безразмерные частота и время

фотонными модами УН. Любопытно, что этот результат не может быть получен в рамках Марковского приближения, как видно из сравнения результатов прямых численных расчетов с аналитическими на рис. 2, b–d.

3. Особенности ван-дер-ваальсовой связи в системе «Атом–УН»

Исходя из изложенных выше особенностей динамики спонтанного распада, можно сделать вывод о сильно нелинейном характере связи атома с вакуумным полем вблизи УН. Из-за резкого увеличения плотности вакуумных фотонных мод константа связи атома с полем является функцией расстояния между атомом и УН, сильно возрастаая с приближением атома к стенке нанотрубки. При этом взаимодействие может переходить в режим сильной связи, когда уровни всей системы не просто смещены относительно невозмущенных, а смещены настолько сильно, что в системе наступает квазивыврождение, сопровождающееся перемешиванием уровней (см. рис. 3). Это соответствует Раби-осцилляциям в

динамике спонтанного распада на рис. 2, *b*, *c*, *d*. С другой стороны, совершенно очевидно, что при этом стандартные, базирующиеся на теории возмущений при отсутствии вырождения модели ван-дер-ваальсовых взаимодействий, перестают быть применимыми.

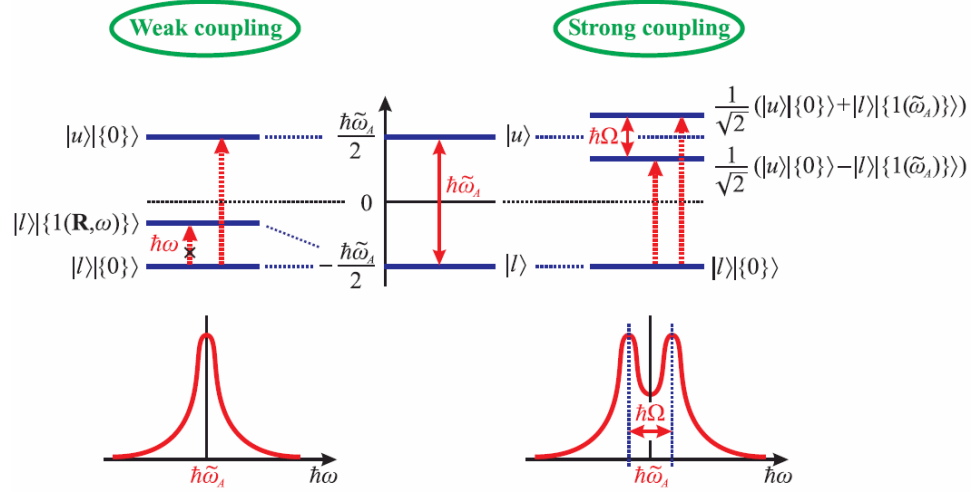


Рис. 3. Схема уровней двухуровневого атома (в центре), взаимодействующего с вакуумным полем УН, в режимах слабой (слева) и сильной (справа) связи. Вертикальными восходящими стрелками слева и справа показаны разрешенные и запрещенные (перечеркнуты) переходы при возбуждении системы «Атом–УН» внешним оптическим полем. Слева и справа внизу показаны соответствующие профили оптического поглощения УН в окрестности частоты атомного перехода. В режиме сильной связи (справа) линия оптического поглощения расщеплена. Частота расщепления совпадает с частотой Раби-осцилляций в динамике спонтанного распада, показанной на рис. 2, *b*, *c*, *d*

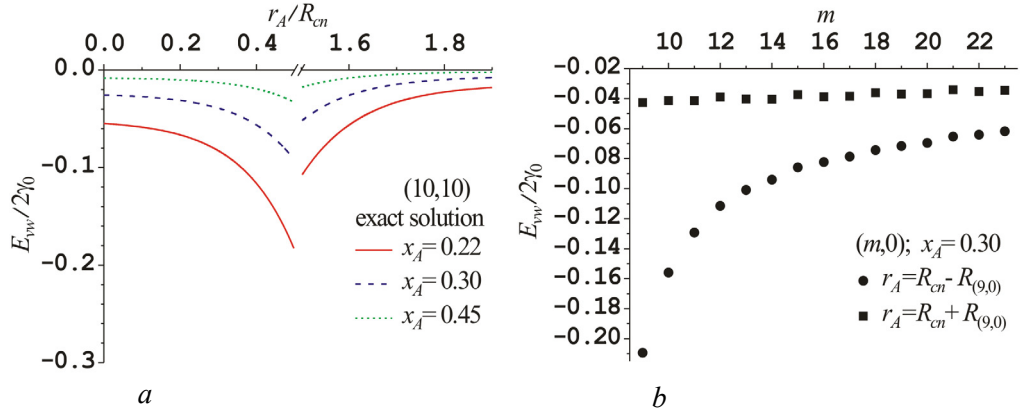


Рис. 4. (а) Энергии Ван-дер-Ваальса двухуровневого атома в основном состоянии около УН (10,10) как функции местоположения атома для трех типичных (безразмерных) частот атомного перехода x_A . (б) Энергии Ван-дер-Ваальса для атома на фиксированном расстоянии от поверхностей УН типа $(m,0)$ возрастающего радиуса (атом зафиксирован снаружи и внутри нанотрубок на расстояниях, равных радиусу УН (9,0))

Наличие эффекта квазивыврождения было учтено в работах 14–16 при выводе энергии ван-дер-ваальсова взаимодействия для атома в основном состоянии вблизи УН. Основные результаты теории представлены на рис. 4, откуда, в частности, следует (см. рис. 4, *a*) практически важный вывод о том, что атомам(ионам)-допантам энергетически выгоднее находиться внутри нежели снаружи УН. Отметим, что пренебрежение эффектом квазивыврождения на малых расстояниях атома от поверхности УН привело бы к нефизической расходимости энергии Ван-дер-Ваальса вблизи поверхности нанотрубки. Любопытно также (см. рис. 4, *b*), что ван-дер-ваальсово взаимодействие атома с металлическими УН (индекс m кратен трем) слегка слабее, чем с полупроводниковыми, что объясняется особенностями процесса обмена виртуальными фотонами между атомом и УН, ответственного за ван-дер-ваальсово взаимодействие.

4. Оптические поглощения атомно-допированными УН

В настоящее время значительный прогресс достигнут в изучении квантовых оптических процессов в полупроводниковых наноструктурах. Сложилось определенное понимание того, что двухуровневые экситонные и спиновые возбуждения в полупроводниковых квантовых точках могут быть применены для реализации принципов квантовой логики в квантовых информационных технологиях [34–36]. При этом значительная доля предлагаемых теоретических концепций базируется на принципах квантовой электродинамики полупроводниковых микрорезонаторов [37–39], где экситонные или межзонные электронные переходы сильно связаны с высокодобротными вакуумными фотонными модами полупроводникового микрорезонатора, образуя таким образом новые квазичастичные состояния среды – экситон-поляритоны, регистрируемые экспериментально по Раби-расщеплению линии экситонного поглощения [40–43]. Недавние эксперименты на квантовых точках в полупроводниковых микрополостях [41, 42] и фотонных кристаллах [43] показали наличие такого расщепления в спектрах оптического поглощения соответствующих наноструктур.

В работах [18, 19] было показано, что аналогичный эффект расщепления линии оптического поглощения должен иметь место и для атомно-допированных УН достаточно малого диаметра в окрестности частоты атомного перехода. Это несложно понять из следующих качественных соображений. Константа связи атома (моделируемого двухуровневой системой с дипольным моментом перехода d_A и частотой перехода ω_A) с вакуумным полем есть $\hbar g = (2\pi d_A^2 \hbar \omega_A / \tilde{V})^{1/2}$, где $\tilde{V}$ – эффективный объем полевой моды, с которой взаимодействует атом (см., например, [31]). Для атома (иона) в нанотрубке радиуса R_{cn} эффективный объем полевой моды есть $\tilde{V} \sim \pi R_{cn}^2 (\lambda_A / 2)$, что порядка $\sim 10^2$ нм³ для УН диаметром ~ 1 нм в оптической области длин волн $\lambda_A \sim 600$ нм. Используя приближение $d_A \sim er \sim e(e^2 / \hbar \omega_A) 30$], получаем $\hbar g \sim 0.3$ эВ. С другой стороны, ширина моды микрорезонатора на частоте ω_A оценивается выражением $\hbar \gamma_c = 6\pi \hbar c^3 / \omega_A^2 \xi(\omega_A) \tilde{V} 31$, где $\xi(\omega_A)$ – фактор усиления атомной

спонтанной эмиссии (Парсел-фактор [29]). Учитывая громадные значения $\sim 10^7$ Парсел-фактора в окрестности УН [23], получаем $\hbar\gamma_c \sim 0.03$ эВ для нанотрубок диаметром ~ 1 нм в оптическом спектральном диапазоне. Таким образом, для атомов (ионов) в атомно-допированных УН малого диаметра условие сильной связи $g/\gamma_c > 1$ выполнено, и образование квазиодномерных атомных поляритонных состояний, являющихся суперпозицией атомного и фотонного состояний (см. рис. 3, справа), становится возможным. Именно это обстоятельство и приводит к осциллирующей динамике атомного спонтанного распада и особенностям вандер-ваальсовых взаимодействий атома с УН, обсуждавшимся выше.

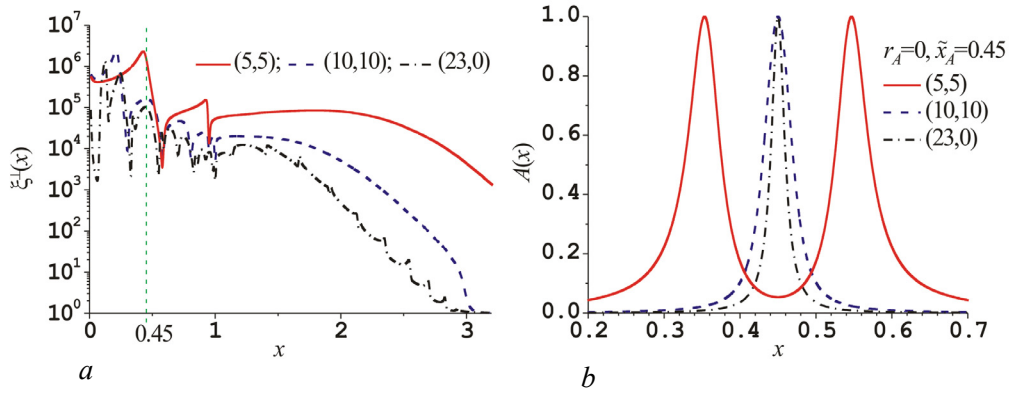


Рис. 5. (а) Частотные зависимости поперечной плотности фотонных состояний для двухуровневого атома, расположенного в центре трех нанотрубок возрастающего радиуса. (б) Соответствующие профили оптического поглощения в окрестности частоты атомного перехода (показана вертикальная штриховая линия на рис.5, а).

См. работы [17, 18]

На рисунке 5 представлены результаты численных расчетов формы линии оптического поглощения для двухуровневого атома в центре трех нанотрубок возрастающего радиуса. Детали расчетов приведены в работах [18, 19]. Раби-расщепление квазиодномерного атомного поляритонного состояния в УН (5,5) составляет ~ 1 эВ, что как минимум на порядок величины превышает типичные значения Раби-расщеплений квазиульмерных экситон-поляритонов в квантовых точках в полупроводниковых микрополостях и фотонных кристаллах (см., например, [41–43]). Такой большой эффект происходит от большей энергии связи оптического электрона в атоме по сравнению с типичной экситонной энергией связи. Предсказываемый эффект открывает новые возможности по использованию атомно-допированных УН в современной нанофотонике при создании различных высококогерентных светоизлучающих устройств по аналогии с теми, которые в настоящее время производятся на основе полупроводниковых наноструктурированных материалов [44–47].

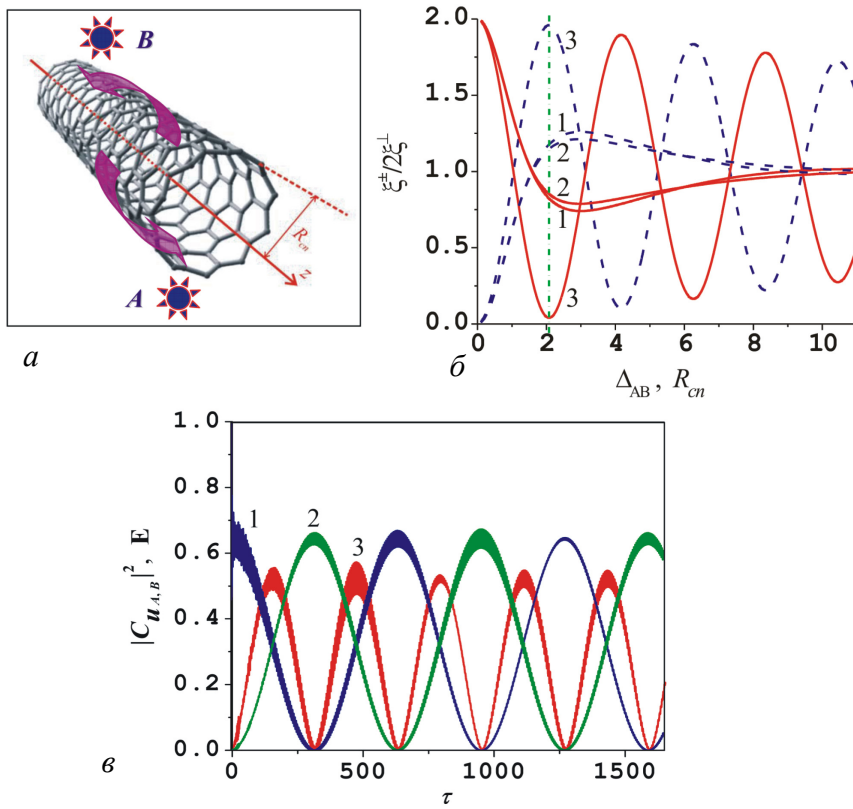


Рис. 6. (a) Иллюстрация взаимодействия и перепутывания двух пространственно-разнесенных атомов посредством обмена поверхностными фотонными возбуждениями нанотрубки. (b) Нормированные двухчастичные функции локальной плотности фотонных состояний ξ^+ (сплошные линии) и ξ^- (штриховые линии) на частотах пиков одночастичных функций поперечных плотностей фотонных состояний $\xi^{\pm}(x)$ (см. рис. 2, a, 5, a) как функции расстояния Δ_{AB} между атомом A и атомом B в центре УН (10,0) (линии 1; $x = 0.29$), (11,0) (линии 2; $x = 0.25$) и (9,0) (линии 3; $x = 0.32$). (c) Временная зависимость заселенностей $|C_{u_i}(\tau)|^2$ верхних уровней атомов A и B (линии 1 и 2) и функции E(τ) перепутывания атомных состояний (энтанглмент) для пары атомов, расположенных в центре металлической УН (9,0) на расстоянии $\Delta_{AB} = 2.1R_{cn} \approx 7.4 \text{ \AA}$ друг от друга (показано вертикальной штрихпунктирной линией на рис. b), при условии начального возбуждения только атома A, [19, 20]

5. Перепутывание пространственно разнесенных атомов близи УН

Совсем недавно [48] была теоретически продемонстрирована возможность стабильной перепутанной конфигурации (энтанглмент) волновых функций двух пространственно-разнесенных двухуровневых экситонных состояний (кубитов), локализованных на двух полупроводниковых квантовых точках в планарном

фотонном нанорезонаторе. Аналогичный эффект для пары квазиодномерных атомных поляритонных состояний в УН изучался в [19, 20]. Основные результаты этих работ представлены на рис. 6. Перепутывание пространственно разнесенных атомных состояний происходит за счет обмена виртуальными поверхностными фотонами нанотрубки. Иллюстрация такого (межатомного) взаимодействия дается на рис. 6, *a*. Взаимодействие тем сильнее, чем сильнее каждый из атомов связан с виртуальными фотонными модами УН. В отличие от полупроводниковых УН в металлических нанотрубках малого диаметра (~ 1 нм) в режиме сильной связи парные локальные плотности фотонных состояний $\xi^\pm$ (отвечают за смешивание коэффициентов заселенности $C_{A,B}$ верхних уровней атомов *A* и *B* с образованием перемешанных комбинаций $C_\pm(0) = [C_A(0) \pm C_B(0)]/\sqrt{2}$) очень слабо затухают при удалении атомов друг от друга (см. рис. 6, *b*); для металлических УН ($m, 0$) типа индекс m кратен трем, так что величина перепутывания (энтанглмента) двух пространственно разделенных атомных состояний оказывается достаточно значительной и слабо затухает со временем. Эффект перепутывания показан на рис. 6, *c* для атомов *A* и *B*, находящихся на расстоянии ≈ 7.4 Å друг от друга (соответствующие значения функций $\xi^\pm$ показаны вертикальной штриховой линией на рис. 6, *b*) в центре металлической нанотрубки (9,0). Изначально возбужден только атом *A*. Видно периодическое увеличение и уменьшение заселенностей верхних уровней атомов *A* и *B*, происходящее в противофазе, что и означает факт того, что атомы периодически обмениваются виртуальными поверхностными фотонами нанотрубки. При этом энтанглмент $E(\tau)$ пространственно разнесенных атомных состояний достигает значительной величины ~ 0.6 , которая не может быть достигнута в режиме слабой связи атомов с УН (в работах [49, 50] было показано, что в режиме слабой связи с локальным окружением максимальное значение энтанглмента двух пространственно разнесенных атомов не может превышать 0.35). Таким образом, металлическая нанотрубка служит тем промежуточным звеном, благодаря которому атомные состояния могут быть контролируемым образом перепутаны. Учитывая, что в настоящее время существуют технологии выращивания сверхдлинных (до нескольких сантиметров [7, 8]) одностенных УН малого диаметра и технологии их допирования единичными атомами (ионами) [5], предсказываемый эффект приобретает важное значение для квантовых информационных технологий, поскольку по сути представляет собой новый метод передачи квантовой информации нанообъектами на макроскопические расстояния.

6. Заключение

В данной работе был выполнен краткий обзор недавних теоретических исследований квантово-электродинамических процессов в атомно-допированных углеродных нанотрубках. Было показано, что так же, как полупроводниковые наноструктурированные материалы и фотонные кристаллы, УН могут менять характер и силу связи примесного атома с вакуумным фотонным полем, обеспечивая при определенных условиях режим сильной связи атома с полем с образо-

ванием квазиодномерных атомных поляритонных состояний. Такие состояния проявляются в виде Раби-осцилляций в динамике спонтанного распада возбужденного атома вблизи УН и могут быть экспериментально зарегистрированы по Раби-расщеплению линии оптического поглощения атомно-допированных УН в области частот вблизи частоты атомного перехода. Исследован процесс взаимодействия пары атомов (ионов), сильно связанных с вакуумными поверхностными фотонными модами УН, и показано, что металлические нанотрубки малого радиуса обеспечивают значительную степень перепутывания пространственно разнесенных атомных состояний на длительных временах. Предсказываемые эффекты открывают новые возможности по применению атомно-допированных УН в нанофотонике и квантовых информационных технологиях.

Литература

1. Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes 1998.
2. Dai H. // Surf. Sci. 2002. Vol. 500. P. 218.
3. Baughman R. H., Zakhidov A. A., de Heer W. A. // Science. 2002. Vol. 297. P. 787.
4. Duclaux L. // Carbon. 2002. Vol. 40. P. 1751.
5. Jeong G.-H., Farajian A. A. et al. // Phys. Rev. 2003. Vol. B 68. P. 075410.
6. Shimoda H., Gao B. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 015502.
7. Zheng L. X., O'Connell M. J. et al. // Nature Materials. 2004. Vol. 3. P. 673.
8. Huang S. M., Maynor B. et al. // Advanced Materials. 2003. Vol. 15. P. 1651.
9. Brandes T. // Phys. Rep. 2005. Vol. 408. P. 315.
10. Sørensen A. S., van der Wal C. H. et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 063601.
11. Benjamin S. C., Ardavan A. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. Vol. 18. P. S867.
12. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Phys. Lett. A 2004. Vol. 328. P. 235.
13. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 035407.
14. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Solid State Commun. 2004. Vol. 132. P. 203.
15. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Opt. Spectrosc. 2005. Vol. 99. P. 475.
16. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 035451.
17. Bondarev I. V., Vlahovic B. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. P. 073401.
18. Bondarev I. V., Vlahovic B. // Physica E. 2007. Vol. 37. P. 105.
19. Bondarev I. V., Vlahovic B. // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 033402.
20. Bondarev I. V., Vlahovic B. // Materials Science and Engineering C. 2007. Vol. 27. P. 1117.
21. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Trends in Nanotubes Research. 2006. P. 139.
22. Bondarev I. V., Lambin Ph. // Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures. 2005. Vol. 13. P. 21.
23. Bondarev I. V., Slepian G. Ya., Maksimenko S. A. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 115504.
24. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. 1981.
25. Vogel W., Welsch D.-G. Quantum Optics. 2006.
26. Knöll L., Scheel S., Welsch D.-G. Coherence and Statistics of Photons and Atoms. 2001.
27. Jorio A., Souza Filho A. G. et al. // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 121402R.
28. Jackson J. D. Classical Electrodynamics. 1962.
29. Purcell E. M. // Phys. Rev. 1946. Vol. 69. P. 681.
30. Давыдов А. С. Квантовая механика. 1973.
31. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. 1956.
32. Andreani L. C., Panzarini G., Gerard J.-M. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 13276.
33. Allen L., Eberly J. H. Optical Resonance and Two-Level Atoms. 1975.

34. *Li X., Wu Y. et al. // Science. 2003. Vol. 301. P. 809.*
35. *Chen G., Bonadeo N. H. et al. // Science. 2000. Vol. 289. P. 1906.*
36. *Biolatti E., Iotti R. C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 5647.*
37. *Cirac J. I., Zoller P. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 3221.*
38. *Duan L.-M., Kimble H. J. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 127902.*
39. *Zubairy M. S., Kim M., Scully M. O. // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68. P. 033820.*
40. *Weisbuch C., Nishioka M. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 3314.*
41. *Reithmaier J. P., Sęk G. et al. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 197.*
42. *Peter E., Senellart P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 067401.*
43. *Yoshie T., Scherer A. et al. // Nature. 2004. Vol. 432. P. 200.*
44. *Henini M. // Materials Today. 2002. Vol. 5(Issue 6). P. 48.*
45. *Michler P., Kiraz A. et al. // Science. 2000. Vol. 290. P. 2282.*
46. *Pelton M., Santori C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 233602.*
47. *Vičković J., Fattal D. et al. // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82. P. 3596.*
48. *Hughes S. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 227402.*
49. *Dung H. T., Scheel S. et al. // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 2002. Vol. 4. P. S169.*
50. *Dung H. T., Knöll L., Welsch D.-G. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063810.*

QUANTUM ELECTRODYNAMIC PHENOMENA IN ATOMICALLY DOPED CARBON NANOTUBES

I. V. Bondarev*

Latest theoretical studies are being reviewed of the near-field electrodynamic properties of atomically doped carbon nanotubes. It has been shown that, similar to semiconductor microcavities and photonic band-gap materials, carbon nanotubes may qualitatively change the character of the atom-electromagnetic-field interactions, yielding strong atom-field coupling with the subsequent formation of the quasi-one-dimensional (quasi-1D) atomic polariton states representing the eigen states of the full atom-vacuum-field Hamiltonian close to the nanotube. For small-diameter (~ 1 nm) atomically doped carbon nanotubes, the calculations performed exhibit both the vacuum-field Rabi oscillations in the atomic spontaneous decay dynamics and the corresponding Rabi splitting of the optical absorption line in the frequency range close to the atomic transition frequency – clear signatures of the strong atom-vacuum-field coupling. The stability of the quasi-1D atomic polaritons is mainly determined by the atom-nanotube van der Waals interaction. The calculations of the ground-state atom van der Waals energy performed within a newly developed quantum mechanical approach valid for both weak and strong atom-field coupling demonstrate the inapplicability of conventional (weak-coupling-based) van der Waals interaction models in a close proximity to the nanotube surface. A simple scheme for entangling the quasi-1D atomic polaritons has been studied, and the small-diameter metallic nanotubes are shown to result in sizable amounts of the two-qubit atomic entanglement with no damping for sufficiently long times. This challenges novel applications of atomically doped carbon nanotubes in nanophotonics and quantum information science.

* North Carolina Central University, USA.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УЕДИНЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. А. Хрущинский, А. Л. Пушкарчук, С. А. Кутень,
С. Я. Килин*, А. П. Низовцев*

1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) со времени их открытия Иджимой в 1991 г. [1] сразу привлекли широкое внимание в силу их уникальных физико-химических свойств. Эти свойства позволяют надеяться на широкое их применение в разнообразных областях науки и техники. Мы не будем перечислять возможные применения, поскольку, как правило, любая статья на тему нанотрубок содержит это перечисление.

В данной работе исследуются механические свойства одностенных углеродных нанотрубок. Из механических свойств выбраны важные для разработки новых материалов упругие константы (модуль Юнга, модуль изгиба, модуль кручения).

Следует заметить, что несмотря на значительное количество работ, посвященных экспериментальному определению упругих констант УНТ и материалов на их основе, количество надежных экспериментальных данных на эту тему весьма ограничено, что связано со сложностью манипулирования наноразмерными объектами. Практически полностью отсутствуют экспериментальные данные по модулю кручения нанотрубок, а те, которые есть, скорее вызывают сомнение, чем доверие. Из-за малого диаметра нанотрубки осуществить корректно чисто торсионную нагрузку на уединенную нанотрубку очень сложно. Для эксперимента используют обычно связку УНТ и вычисляют потом модули кручения уединенной нанотрубки [2]. Такая процедура дает завышенную оценку модуля (~ 1 ТПа). Однако уже в работе [3] эксперименты были проведены на единичных нанотрубках и дали в результате (хотя и с большой ошибкой) оценку модуля кручения 0.41 ± 0.36 ТПа. Оценки же методом молекулярной динамики дают величину порядка нескольких сотен ГПа, т. е. близки к оценке в работе [3].

Вместе с тем на практике торсионные деформации являются довольно частым явлением. Поэтому расчеты на основе молекулярной динамики и квантовой химии упругих констант для нанотрубок представляют непосредственный интерес для практики. Модуль Юнга для свободных от примесей нанотрубок был получен в ряде работ на основе различных экспериментальных методик. В работе [4] это было сделано на основе исследования амплитуды тепловых колебаний концов нанотрубки, в [5] с помощью атомного силового микроскопа, исследуя деформацию изгиба. Экспериментальный результат для модуля Юнга лежит в пределах одного ТПа. Это близко к значениям модуля Юнга для графита, однако экспериментальные ошибки достаточно велики. Большой разброс имеет место и в теоретических оценках [6], см. также [8] и ссылки в ней.

* Институт физики НАН Беларуси, Минск.

Определение упругих констант важно во многих прикладных аспектах, в частности при производстве композитов на основе УНТ, разработке и производстве наномеханизмов.

Уединенная нанотрубка характеризуется двумя целыми числами (индексы киральности). Эти числа определяют все свойства нанотрубок. Данная работа посвящена исследованию зависимости механических свойств (упругие константы при деформации растяжения, изгиба и кручения) УНТ от индексов киральности.

2. Расчет на основе методов молекулярной динамики упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности

Для расчета упругих постоянных УНТ были использованы методы молекулярной динамики (МД). Хотя они базируются на классических уравнениях Ньютона, МД достаточно успешно описывает динамику атомов в сложных молекулах в широком диапазоне условий, исключая область очень низких температур.

Итак, основные уравнения МД есть уравнения Ньютона:

$$\frac{d^2 r^i}{dt^2} = F^i(r^1, \dots, r^i, \dots) = -\frac{\partial V(r^1, \dots, r^i, \dots)}{\partial r^i} \quad (1)$$

или уравнения Гамильтона, определяемые гамильтонианом:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(r^1, \dots, r^j, \dots), \quad (2)$$

где $V(r^1, \dots, r^j, \dots)$ – потенциал взаимодействия атомов в молекуле и моделирующей химические связи. Различные варианты метода МД отличаются в основном формой этого потенциала. Для описания C–C, C–H и других углеродных связей используют обычно Терсов – Бренер (Tersoff – Brenner) потенциал [12–16]:

$$V(r_{ij}) = f_c(r_{ij})(f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})), \quad (3)$$

где $f_R(r) = Ae^{-\lambda_1 r}$; $f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r}$, а функция обрезания $f_c(r)$ определяется уравнением

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & r < (R - D) \\ 0.5 - 0.5 \sin(0.5\pi(R - D)/D) & (R - D) < r < (R + D) \\ 0 & r > (R + D) \end{cases} \quad (4)$$

Функция b_{ij} определяется характером связи (одиночная, двойная, тройная), а также углами между соседними связями для учета стереохимических эффектов. Параметры этого потенциала выбираются из соображений наилучшей подгонки длины связи и ее энергии в основном состоянии молекулы. Явный вид b_{ij} можно найти в работах [12–16]. R – длина связи, D – длина переходной об-

ласти функции обрезания. Один из возможных наборов параметров приведен в табл. 1 [12].

В МД межмолекулярное взаимодействие (Ван-дер-Ваальса) описывается обычно с помощью потенциала Ленарда – Джонсона (Lennard – Jones) [17]:

$$V^{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (5)$$

Для исследования равновесных конфигураций основного уровня необходимо найти безусловный минимум суммарной энергии. При решении динамических проблем задача моделирования в МД сводится к решению большого числа связанных обыкновенных дифференциальных уравнений с указанными выше потенциалами.

Таблица 1

Основные параметры потенциала Tersoff – Benner

A (эВ)	B (эВ)	λ_1 (Å ⁻¹)	λ_2 (Å ⁻¹)	R (Å)	D (Å)
13036	346.7	3.4879	2.2119	1.95	0.2

В большинстве программ молекулярного моделирования на этих решениях строятся функционалы полной энергии, полной кинетической энергии, полной потенциальной энергии. Ясно, что эти функционалы зависят от начальных условий. Если начальные условия выбрать так, чтобы они соответствовали чистой деформации определенного вида, то эти функционалы будут зависеть от величины этой деформации. Тогда, используя приемы континуальной теории упругости, будем иметь:

1. Продольное сжатие и модуль Юнга

$$Y = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{axial}}{\partial \varepsilon^2}, \quad (6)$$

где W_{axial} – энергия упругой деформации, ε – относительная деформация (сжатие или растяжение), V_0 – объем оболочки, моделирующей нанотрубку ($V_0 = 2\pi L R \delta R$), L – длина нанотрубки, R – радиус УНТ, δR – толщина оболочки. Однако в отношении последней нет единого подхода. Чаще всего значение этой величины принимают равным расстоянию между графитовыми плоскостями, т. е. 0.34 нм. Мы также в данной работе принимаем это соглашение. Хотя в работе [7] использовалась толщина оболочки 0.06 нм, и именно в ней была получена наиболее завышенная величина оценки модуля Юнга, существенно выше экспериментальной.

2. Деформация изгиба

Жесткость на изгиб определяется уравнением [22]

$$K = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 W_b}{\partial C^2}, \quad (7)$$

где W_b – энергия деформации изгиба, L – длина нанотрубки, C – кривизна изгиба

УНТ, которая соотносится с углом изгиба θ формулой $C = \theta/L$. Из общей теории цилиндрических оболочек [23] следует связь жесткости K с модулем Юнга Y :

$$K = Y_b \delta R (\pi R^3). \quad (8)$$

3. Деформация кручения

Формула для расчета модуля кручения в данном случае есть [22]

$$G_\theta = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{tw}}{\partial \gamma^2}, \quad (9)$$

где W_{tw} – упругая энергия деформации кручения, V_0 – равновесный объем, определяемый в данном случае выражением

$$V_0 = 2\pi L R \delta R. \quad (10)$$

Величина γ равна длине дуги закручивания, отнесенной к длине нанотрубки:

$$\gamma = \frac{R \varphi}{L}. \quad (11)$$

L – длина; R – радиус УНТ в равновесном состоянии; δR – толщина стенок нанотрубки.

2.1. Подготовка исходного напряженного состояния нанотрубки различных киральностей

Исходная геометрия деформированного состояния нанотрубки приготавлилась с помощью программы NanotubeModeler. Для исследования эффектов киральности на механические свойства нанотрубок были взяты нанотрубки примерно одного радиуса и шести киральностей. Основные свойства выбранных нанотрубок приведены в табл. 2.

Таблица 2

Киральность использованных нанотрубок (n, m), их радиус, длина и объем оболочки в предположении, что ее толщина равна 0.34 нм. Длина УНТ относится к трубкам, подвергавшимся деформации изгиба и кручения, для сжатия это было 80 Å

(n, m)	8,0	6,2	5,3	6,3	5,4	5,5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
L (Å)	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0	45.0
V_0 (Å ³)	2789.52	2514.96	2441.39	2767.98	2724.02	3020.11

Для каждой нанотрубки с заданной киральностью и длиной приготавливались деформированные состояния. Исследуемые деформации: аксиальное растяжение/сжатие, изгиб, кручение. На рис. 1 приведены изображения нанотрубок до и после деформации для деформации изгиба.

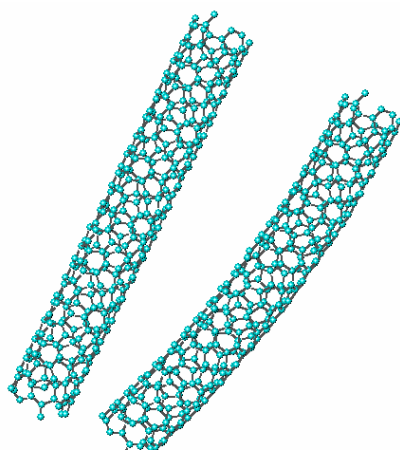


Рис. 1. Деформация изгиба (слева исходная трубка (8,0), справа – деформированная)

2.2. Расчет и результаты для упругой энергии и оценки упругих модулей в случае незаполненных нанотрубок

Используя приготовленные начальные состояния для разных видов и значений деформаций с помощью программы «HyperChem», были рассчитаны функционалы полной энергии для всех упомянутых выше нанотрубок. В качестве примера величины полной энергии нанотрубки в зависимости от величины деформаций приведены на рис. 2. для нанотрубки с киральными индексами (8,0).

Используя уравнения (7–9), были определены соответствующие упругие постоянные.

1. Модуль Юнга

Таблица 3

Величины модуля Юнга (Y) для УНТ разной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
Y (ТПа)	1.32	1.38	1.24	1.25	1.23	1.24

Из таблицы 3 видно, что величина модуля Юнга в пределах ошибок ($\sim 30\%$) расчетов не зависит от киральности. Более того, она в пределах тех же ошибок [8] не зависит и от радиуса.

Имеющиеся в наличии к настоящему времени экспериментальные значения приведены в табл. 4.

Они были определены двумя методами: исследованием спектра тепловых колебаний нанотрубки и методом измерения возвращающей силы с помощью атомного силового микроскопа.

Таблица 4

Известные экспериментальные значения модуля Юнга

Метод	Тепловые колебания [18] МСУНТ	Возвращающая сила при изгибе [19] МСУНТ	Тепловые колебания [20] УНТ	Возвращающая сила при изгибе [21] УНТ
Y (ТПа)	1.8 ± 1.4	1.28 ± 0.59	1.7 ± 1.4	1.0

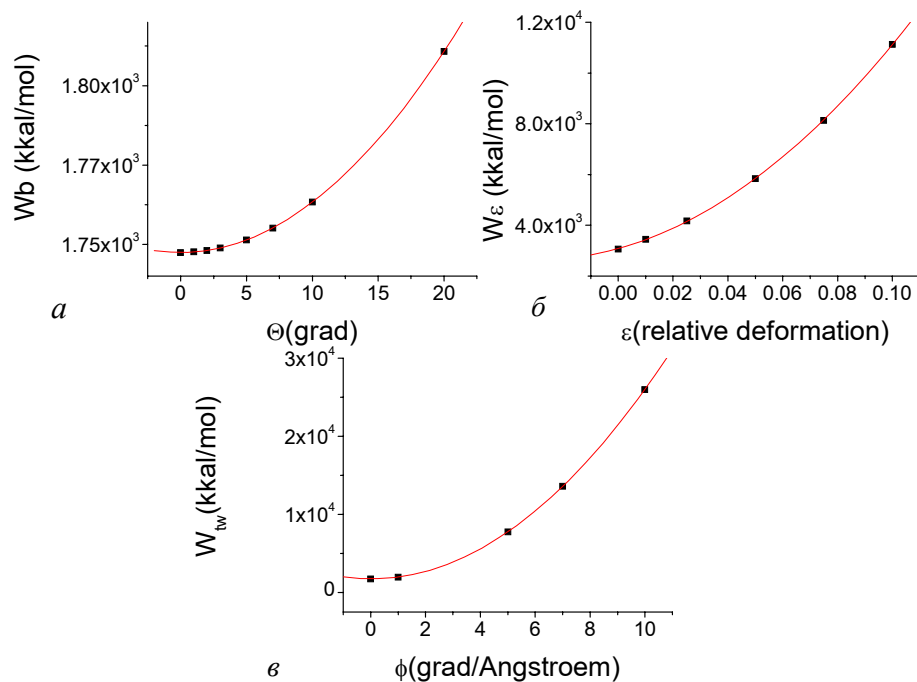


Рис. 2. Рассчитанные значения функционалов полной энергии как функции соответствующих деформаций для: *a* – деформация изгиба; *б* – деформация растяжения; *в* – деформация кручения

Видно, что полученные нами значения модуля Юнга в пределах экспериментальных и расчетных ошибок совпадают с экспериментальными. Они также совпадают с большинством оценок других авторов, см. в работе [8].

2. Деформация изгиба

Таблица 5

Значение жесткости K и модуля Юнга Y_b на изгиб для нанотрубок разной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.203	0.149	0.135	0.199	0.186	0.264
Y_b (ГПа)	1.013	1.015	1.006	1.020	0.997	1.039

Как видно из табл. 5, здесь так же, как и в предыдущем пункте, модуль Юнга не зависит от киральности в пределах ошибок моделирования. Что касается жесткости, то, как известно [22], она зависит от радиуса по кубическому закону. Поскольку мы исследовали зависимость упругих постоянных от киральности, то были выбраны нанотрубки примерно одинакового радиуса и упомянутый выше закон не мог проявиться достаточно отчетливо.

3. Деформация кручения

Таблица 6

Значение модуля Юнга кручения G_θ для нанотрубок различной киральности

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
G_θ (ТПа)	0.383	0.386	0.304	0.344	0.286	0.271

Как уже говорилось во введении, надежные экспериментальные данные по модулю кручения в настоящее время отсутствуют по понятным причинам. Наш результат соответствует результатам расчетов других авторов, в частности [24] и экспериментальным результатам в [3], хотя в три раза меньше, чем в [2]. Анализ табл. 6 показывает наличие, хотя и слабой, зависимости модуля кручения от киральности нанотрубок. Нанотрубка (8, 0) имеет больший модуль кручения, нежели нанотрубки (5, 4) и (5, 5), имеющие примерно тот же радиус, что и нанотрубка (8, 0).

2.3. Расчет и результаты для упругой энергии и упругих постоянных в случае нанотрубок, содержащих одну молекулу водорода

Исходная структура деформированного состояния была такая же, как и в п. 2, но в деформированную нанотрубку в центр помещалась одна молекула водорода. По уравнениям (7–9) были рассчитаны жесткость и модуль Юнга на изгиб для нанотрубок, содержащих молекулу водорода. Их значения приведены в табл. 7.

Таблица 7

Значение жесткости K и модуля Юнга Y_b на изгиб для нанотрубок разной киральности при наличии двух атомов водорода в нанотрубке

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.2025	0.148	0.135	0.199	0.185	0.263
Y_b (ТПа)	1.0108	1.011	1.006	1.018	0.995	1.036
G_θ (ТПа)	0.384	0.382	0.307	0.356	0.287	0.271

Сравнение величин жесткости и модуля Юнга из табл. 5 и 7 показывает, что существенной разницы между ними нет. Это и следовало ожидать, поскольку ван-дер-ваальсово взаимодействие атомов водорода с нанотрубкой достаточно слабо, чтобы изменить ощутимо упругие константы УНТ.

Таблица 8

Значение модуля изгиба для нанотрубок различной киральности, содержащих 10 молекул водорода

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
K (эВ·мкм)	0.2024	0.161	0.135	0.199	0.186	0.263
Y_b (ТПа)	1.010	1.097	1.008	1.018	0.997	1.035

3. Частоты собственных мод колебаний в МД описании

Расчет частот собственных мод колебаний в МД подходе сводится к тому, что нанотрубку подвергают сначала определенной деформации, готовится состояние, когда атомы углерода сдвинуты из положения равновесия. После этого прослеживается динамика всех атомов УНТ, решая связанную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (см. выше), рассматривая приготовленное состояние как начальное. На решениях этих уравнений строятся функционалы полной кинетической и потенциальной энергий.

Ясно, что собственные моды низкочастотных колебаний УНТ присутствуют в этих функционалах. Большинство программ МД рассчитывают эти функционалы. Исследовав Фурье спектр этих функционалов, определяют собственные моды. Такой подход был реализован нами для всех отобранных нанотрубок, но результат приводится ниже только для УНТ (8,0) для двух случаев начальной деформации: сжатие и изгиб. На рис. 3 представлены амплитудные спектры потенциальной энергии для этих двух случаев. Для случаев сжатия и сдвига присутствуют частоты:

- деформация сжатия: $f \sim 0.1$ ТГц; 0.57 ТГц; 1.15 ТГц; 6.26 ТГц;
- деформация сдвига: $f \sim 0.141$ ТГц; 0.413 ТГц; 6.26 ТГц.

Эти величины достаточно хорошо совпадают с величинами, приведенными в табл. 9 для нанотрубки (8,0)

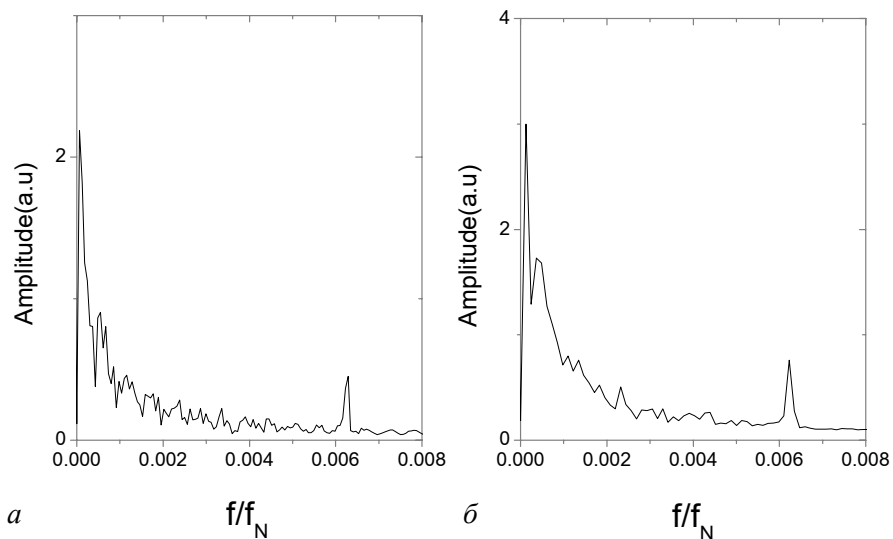


Рис. 3. Амплитудный спектр колебаний потенциальной энергии. По оси абсцисс – частота в долях частоты Нейквиста = 10^{15} ГГц, по вертикальной оси – амплитудный спектр: *a* – при возбуждении нанотрубки за счет продольного сжатия; *б* – при возбуждении нанотрубки за счет изгиба

Полученные частоты могут быть сравнимы с оценками по теории оболочек, поскольку модули Юнга были уже оценены выше. Так, для колебаний вдоль оси нанотрубки, имеем [25]

$$\omega = \frac{1}{4L} \sqrt{\frac{Y}{\rho}}, \quad (12)$$

где Y – модуль Юнга, L – длина нанотрубки (в нашем рассмотрении – 45 Å), ρ – плотность вещества оболочки в оболочечной модели нанотрубки, которая при условии, что толщина оболочки принята равной 3.4 Å, составляет величину порядка $9.5 \cdot 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$.

Для поперечных (изгибных) мод имеем более сложную формулу [25]:

$$f_i = \frac{k_i^2}{2\pi L^2} \sqrt{\frac{Y_b I}{\rho A}}, \quad (13)$$

где Y_b – модуль Юнга на изгиб, I – момент инерции $= \pi R t (4R^2 + t^2)$, A – площадь сечения оболочки, моделирующей нанотрубку $= 2\pi R t$, k_i – константы, рассчитываемые из модели оболочек и для трех нижних мод, принимающие значения 1.875, 4.694, 7.855 соответственно, t – толщина оболочки.

В соответствии с ранее рассчитанными значениями модуля Юнга для выбранных нами УНТ имеем следующие значения частот (табл. 9).

Таблица 9

Значения частот продольных колебаний нанотрубок (f) и частот трех первых мод поперечных колебаний (f_1, f_2, f_3) нанотрубок различной киральности из теории оболочек

(n, m)	8, 0	6, 2	5, 3	6, 3	5, 4	5, 5
R (Å)	3.109	2.803	2.721	3.085	3.036	3.366
Y (ТПа)	1.32	1.38	1.24	1.25	1.23	1.24
F (ТГц)	0.104	0.106	0.101	0.101	0.101	0.101
Y_b (ТПа)	1.013	1.015	1.006	1.020	0.997	1.039
f_1 (ТГц)	0.143	0.132	0.129	0.142	0.196	0.154
f_2 (ТГц)	0.895	0.829	0.808	0.893	0.872	0.965
f_3 (ТГц)	2.507	2.322	2.262	2.501	2.44	2.702

Эти результаты следует сравнить для трубки (8, 0) с теми, что получены методом МД. Согласие довольно хорошее.

Как видно из табл. 9, частоты продольных колебаний довольно отчетливо зависят как от радиуса, так и от индексов киральности. Это означает, что исследуя спектр поперечных низкочастотных колебаний нанотрубок, можно попытаться определить одновременно киральность и радиус УНТ.

На обоих графиках можно видеть максимум на частоте: $f = 0.0063 f_N = 6.3 \cdot 10^{12} \text{ Гц} = 200 \text{ см}^{-1}$, эта частота соответствует нижней частоте комбинационного рассеяния для нанотрубки [26] и лежит в терагерцовой области.

4. Заключение

В работе приведены результаты модельных расчетов упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности и примерно одинакового радиуса. Рассматривались свободные недопированные нанотрубки, нанотрубки, допированные одной молекулой водорода, допированные многими молекулами водорода. Используя методы и программы для молекулярной динамики, показано следующее.

Модуль Юнга для недопированных нанотрубок различной киральности лежит в диапазоне 1.23–1.38 ТПа и слабо зависит от киральности и радиуса [8] нанотрубок. Эти утверждения хорошо совпадают с утверждениями других авторов, производивших расчеты упругих постоянных, и немногочисленными экспериментальными данными (1.28 ± 0.59 [19] – 1.8 ± 1.4 [18]).

Жесткость на изгиб и модуль изгиба для исследованного набора нанотрубок лежат в диапазонах 0.135–0.264 эВ·мкм и 0.997–1.036 ТПа соответственно. Большой разброс жесткости определяется кубической зависимостью жесткости от радиуса и разбросом, хотя и слабым по радиусу исследуемого набора нанотрубок. Что же касается модуля изгиба, то он не зависит в пределах ошибок моделирования от киральности и радиуса.

Модуль кручения для рассмотренных нанотрубок лежит в диапазоне 0.271–0.383 ТПа. Имеет место слабая зависимость от индексов киральности нанотрубки. Для практических целей ею можно, как правило, пренебречь. У большинства авторов, проводивших моделирование упругих свойств нанотрубок с помощью методов молекулярной динамики или квантовой химии, значения модуля кручения с точностью до 30 % совпадают с полученными в настоящей работе.

Экспериментальное значение [2], полученное на жгуте нанотрубок, составляет величину ~ 1 ТПа и вряд ли может рассматриваться как надежный результат. Экспериментальное значение модуля кручения (0.41 ± 0.36 ТПа), полученное в работе [3], достаточно близко к полученным в нашей работе.

Исследование тех же модулей для нанотрубок, содержащих в центре одну или несколько молекул водорода, показало, что эти модули совпадают в пределах точности с таковыми для недопированных нанотрубок.

Тот факт, что значения упругих модулей не меняется от наличия молекулярного водорода в нанотрубке, позволяет утверждать, что можно использовать анализ колебаний нанотрубок для оценки содержания водорода в нанотрубке, что очень важно, если нанотрубки найдут применение в водородной энергетике.

В работе проведено исследование низкочастотных колебаний отобранных нанотрубок. Было установлено, что частоты продольных (вдоль оси нанотрубки) колебаний не зависят от индексов киральности, в то время как для поперечных (инициированных изгибом нанотрубки) колебаний имеет место явная зависимость частоты от индексов киральности. Этот факт может послужить отправным пунктом для развития методов экспериментального определения индексов киральности нанотрубок.

То, что на спектрах потенциальной энергии присутствует частота комбинационных колебаний 200 см^{-1} , говорит о том, что методы молекулярной динамики позволяют проводить расчеты спектров комбинационного (рамановского) рассеяния на нанотрубках, по крайней мере, для низкочастотного участка.

Литература

1. Iijima S. // Nature. 1991. Vol. 354. P. 56
2. Salvat J. P., Andrew G. et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 82. P. 944.
3. Hall A. R., An L. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P. 256102.
4. Treacy M. M. J., Ebbesen T. W., Gibson J. M. // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678.
5. Wong E. W., Seedan P. E., Lieber C. M. // Science. 1997. Vol. 277. P. 1971.
6. Iijima S., Brabec C. et al. // J.Chem.Phys. 1996. Vol. 104. P. 2089.
7. Yakobson B. I., Brabec C., Bernholc J. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 2511.
8. Елецкий А. В. // УФН. 2007. Vol. 177. P. 233.
9. Brenner D. W. // Phys. Stat. Sol. B. 2000. Vol. 217. P. 23.
10. Brenner D. W., Shenderova O. A. et al. // J. Phys. Condens. Matter. 2002. Vol. 14. P. 783.
11. Tersoff J. // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 2872.
12. Brenner D. W. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 9458.
13. Tadmor E. B., Smith, G. S. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 235.
14. Lennard-Jones J. E. // Proc. Physical Society. 1931. Vol. 43. P. 461.
15. Poncharal P. et al. // Science. 1999. Vol. 283. P. 1513.
16. Iijima S. et al. // J.Chem.Phys. 2000. Vol. 104. P. 2089.
17. Treacy M. M. J. et al. // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678.
18. Wong W. E. et al. // Science. 1997. Vol. 277. P. 1991.
19. Srivastava D., Wei C., Cho K. // ASME. 2003. Vol. 56. P. 215.
20. Li C., Chou T-W. // Int. J. Solids Structures. 2003. Vol. 40. P. 2487.
21. Ming-Jun C., Ying-Chun L. et al. // Chinese Phys. 2006. Vol. 15. P. 2676.
22. Chen X., Cao G. // Nanotechnology. 2006. Vol. 17. P. 1004.
23. Ястебов Н. Г., Иванов-Омский В. И., Кособужин В. А. // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 30. С. 47.

RESEARCH OF MECHANICAL PARAMETERS OF INDIVIDUAL CARBON NANOTUBES BY METHODS OF THE MOLECULAR DYNAMIC

A. A. Khrutchinsky, A. L. Pushkarchuk, S. A. Kuten, S. Ja. Kilin*,
A. P. Nizovtsev*

Elastic modules of nanotubes have been investigated by methods of the molecular dynamics. It has been shown, that the Young's modulus for undoped nanotubes of a different chirality lays in the range 1.23–1.38 TPa and slightly depends on their chirality and radius.

Bending stiffness and modulus for the investigated set of nanotubes lay in the ranges 0.135–0.264 eV um and 0.997–1.036 TPa, respectively. The torsion modulus for nanotubes of interest lays in the range 0.271–0.383 TPa showing a weak dependence on chirality indexes.

Low frequency oscillations of nanotubes under consideration has been carried out. It has been shown, that frequencies of longitudinal (along the nanotube axis) oscillations do not depend on chirality indexes, while for transversal (initiated by curving of a nanotube) oscillations a certain relation between the frequency and chirality indexes takes place. This fact can be a start point for development of experimental methods for the determination of the nanotube chirality indexes.

* Institute of Physics, Minsk, Belarus.

ПРОЦЕССЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ

А. В. Мадьяров

Оптические и электронные свойства квантовых точек (КТ) в настоящее время являются объектом интенсивных исследований благодаря потенциальным возможностям их применения в различных областях науки и техники: в физике полупроводниковых устройств, для создания принципиально новых светодиодов и лазеров [1], элементов хранения и передачи квантовой информации [2].

В последнее десятилетие выполнен ряд исследований соответствий и принципиальных отличий между атомными двухуровневыми системами и экситонами в КТ. В частности, в КТ были обнаружены явления, аналогичные наблюдаемым в атомах: экситонный оптический эффект Штарка, фотонное эхо и осцилляции Раби (ОР).

ОР – фундаментальное явление в физике двухуровневых систем. При взаимодействии такой системы (например, атома, экситона в полупроводниковой квантовой яме или в квантовой точке) с электромагнитным полем высокой интенсивности возникает периодическое изменение ее квантового состояния (см., например, [3, 4, 5]). В результате путем изменения интенсивности оптического возбуждения возможно осуществлять управление процессами перехода системы между уровнями, т. е. осуществлять элементарные логические операции (логическое НЕ, И, ИЛИ и др.). Экситонные ОР в КТ наблюдались экспериментально в ряде работ (см. например, [3]). Показано, что данное явление может быть использовано для выполнения различных логических операций, что дает возможность создания элементов на основе КТ для выполнения квантовых вычислений [3].

В настоящее время большую актуальность приобретают исследования, направленные на изучение физических свойств системы «КТ + электромагнитное поле» и определение условий, при которых они могут оказывать влияние на характеристики осцилляций Раби и, как следствие, на логические вычисления. Особенность квантовой точки заключается в том, что ее внутреннее поле, действующее на носители заряда (локальное поле), отлично от воздействующего [6]. В рамках макроскопической электродинамики локальное поле E_L определяется выражением [6] $E_L = E_0 - 4\pi N \langle \hat{P} \rangle$, где N – тензор деполяризации, определяемый формой КТ, $\langle \hat{P} \rangle$ – макроскопическая поляризация. Второй член является деполяризующим полем, возникающим вследствие экранирования внешнего поля зарядами, индуцированными на поверхности КТ. Учет локального поля в КТ, взаимодействующей с классическими полями, приводит к возникновению точки бифуркации и ангармонизма в ОР, а также нелинейной зависимости периода колебаний от напряженности внешнего поля [7]. Подобное поведение периода экспериментально наблюдалось в системе из изолированных квантовых островков, локализованных в одиночной квантовой яме [8]. В настоящей работе теоретически исследуется влияние локального поля на характеристики осцилляций Раби экситона в

КТ, взаимодействующей с различными классическими и квантовыми полями.

Пусть одиночная сферическая КТ взаимодействует с одномодовым электромагнитным полем, линейно поляризованным вдоль оси x КТ, которое возбуждает в ней одиночную электрон-дырочную пару (экситон). В дальнейшем экситон в КТ рассматривается как пространственно ограниченный, квантовый двухуровневый осциллятор. При этом считается, что кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой считается пренебрежимо малым. При взаимодействии с классическим полем, имеющим частоту ω : $E(t) = E_{0x}(t) \equiv E_0 = \tilde{E}(t) \cos \omega t$, рассматриваемая система описывается гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V\hat{P}E_0 + \Delta\hat{H}. \quad (1)$$

В данном соотношении, H_0 – гамильтониан электрон-дырочной пары, V – объем КТ, $\hat{P} = V^{-1}(\mu\hat{b}^+ + \text{Э.с.})$ – оператор поляризации, в выражении которого μ – компонента дипольного момента перехода экситона между уровнями, $\hat{b}^+$ ($\hat{b}$) – операторы рождения (уничтожения) экситона. Последний член в (1), учитывает эффект локального поля в системе:

$$\Delta H = (4\pi/3V)|\mu|^2 (\hat{b}\langle\hat{b}^+\rangle + \hat{b}^+\langle\hat{b}\rangle).$$

Пусть зависящая от времени волновая функция системы «КТ + электромагнитное поле» определяется выражением [4, 6]: $|\psi\rangle = A(t)|e\rangle + B(t)|g\rangle$, в котором A , B являются амплитудами вероятности нахождения экситона в возбужденном $|e\rangle$ и основном $|g\rangle$ состояниях соответственно. После подстановки данной волновой функции и гамильтониана (1) во временное уравнение Шредингера и использования приближения медленно меняющихся амплитуд, можно получить следующую систему уравнений:

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = \hbar\Delta\omega A|B|^2 - \frac{1}{2}\Omega_R B e^{i\delta}, \quad i\hbar \frac{dB}{dt} = \hbar\Delta\omega B|A|^2 - \frac{1}{2}\Omega_R A e^{-i\delta}. \quad (2)$$

В данных уравнениях $\Omega_R = |\mu|\tilde{E}(t)/\hbar$ – частота Раби, $\delta = \omega - \omega_0$ – частотная расстройка, ω_0 – частота перехода экситона. Величина

$$\Delta\omega = \frac{4\pi}{3\varepsilon_h\hbar V}|\mu|^2 \quad (3)$$

является постоянной локального поля (деполяризационным сдвигом), ε_h – диэлектрическая проницаемость материала КТ вдали от экситонного резонанса.

При взаимодействии КТ с одномодовым квантовым электромагнитным полем: $\hat{E}_0 = gc + \text{Э.с.}$ (c/c^+ – операторы рождения/уничтожения фотонов, g – константа взаимодействия экситона с электромагнитным полем). Тогда гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H = H_0 + H_{ph} + V\hat{P}\hat{E}_0 + \Delta H, \quad (4)$$

где H_{ph} – гамильтониан фотонов поля. В данном случае, зависящая от времени волновая функция системы «КТ + квантовое электромагнитное поле» определяется следующим образом [4, 6]: $|\psi\rangle = \sum_{n \geq 0} [A_n(t)|e\rangle + B_n(t)|g\rangle]|n\rangle$, где A_n , B_n

являются амплитудами вероятности нахождения экситона в возбужденном $|e\rangle$ и основном $|g\rangle$ состояниях соответственно; $|n\rangle$ обозначает состояние поля с n фотонами.

$$i \frac{dA_n}{dt} = \Omega_n B_{n+1} e^{i\delta t} + \Delta \omega B_n \sum_{m=0}^{\infty} A_m B_m^*, \quad i \frac{dB_{n+1}}{dt} = \Omega_n^* A_n e^{-i\delta t} + \Delta \omega A_{n+1} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^* B_m. \quad (5)$$

В данных уравнениях $\Omega_n = g\sqrt{n+1}$. Таким образом, в отличие от классического случая атомной системы [4, 5] взаимодействие КТ с электромагнитным полем определяется двумя частотными параметрами взаимодействий, частотой Раби и $\Delta\omega$, в зависимости от соотношения между которыми, как будет показано ниже, могут возникать два типа ОР.

Из системы (3) можно найти инверсную населенность (далее просто инверсность), определяемую как разность населенностей возбужденного и основного состояний экситона: $w(t) = \sum_n (|A_n(t)|^2 - |B_n(t)|^2)$. Данная величина будет ис-

пользована для анализа временной эволюции ОР.

Пусть экситон в КТ, находящийся в момент $t = 0$ в основном состоянии, взаимодействует с электромагнитным полем в когерентном состоянии: $|s\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} F_n(0)|n\rangle$, где $F_n(0) = \exp[-\langle n(0) \rangle / 2] \langle n(0) \rangle^{n/2} / \sqrt{n!}$ – функция распределения фотонов и $\langle n(0) \rangle$ среднее число фотонов в поле. Тогда начальные условия для (3) имеют следующий вид: $A_n(0) = 0$, $B_n(0) = F_n(0)$. Для изучения ОР удобно ввести безразмерный параметр $\xi = \Omega_{\langle n \rangle} / \Delta\omega$, в котором $\Omega_{\langle n \rangle} = 2g\sqrt{\langle n(0) \rangle}$ является усредненной частотой Раби, характеризующей напряженность светового поля [4]. Ограничимся рассмотрением процесса взаимодействия системы при отсутствии релаксации и в режиме точного резонанса: $\delta = 0$. На рис. 1 отображены результаты расчетов инверсности для $\langle n(0) \rangle = 9.0$ и различных значений ξ . Известно, что картина ОР в идеальной атомной системе (при отсутствии локального поля и релаксационных процессов), взаимодействующей с одномодовым когерентным полем, не зависит от параметра g [4, 5]. При этом во временной эволюции инверсности возникают области коллапса и спонтанных возрождений населенностей [4, 5]. Численное решение уравнений (3) показывает, что при больших ξ ($\xi \geq 40$) поведение ОР аналогично случаю отсутствия локального поля ($\xi \rightarrow \infty$ при $\Delta\omega \rightarrow 0$), как показано на рис. 1, e.

В зависимости от ξ в ОР возникают два различных режима колебаний. Первый из них проявляется при $\xi < 0.5$ и характеризуется периодическими осцилля-

циями инверсности в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq -0,5$ (рис. 1 *a, б*). Во втором режиме, возникающем при $\xi > 0,5$, инверсность колеблется в диапазоне $-1 \leq w(t) \leq 1$ (рис. 1, *в-е*). Данные два режима разделены точкой бифуркации, возникающей при $\xi_b = 0,5$ (сравните рис. 1, *б* и *в*). В окрестности точки бифуркации поведение Раби осцилляций является хаотическим (рис. 1, *в, з*) и значительно отличается от явления коллапса – возрождений (сравните с рис. 1, *е*).

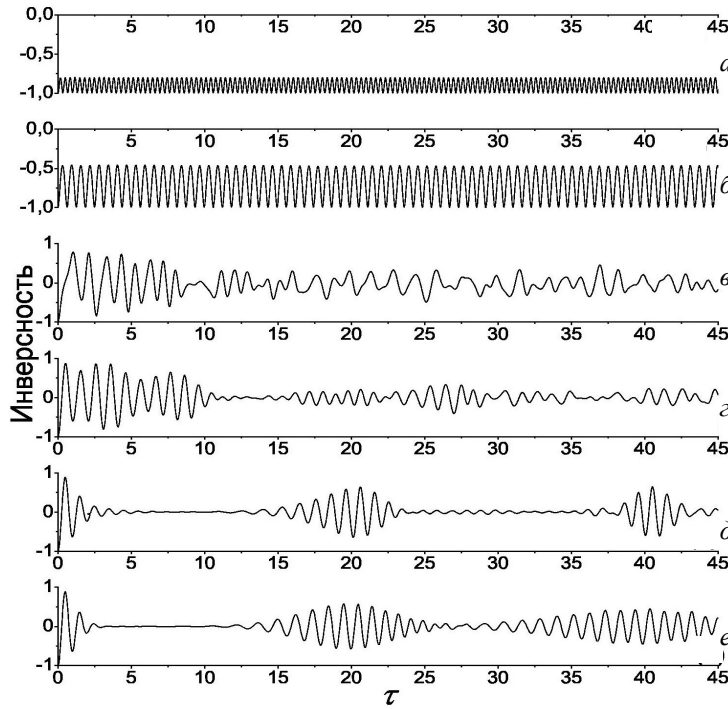


Рис. 1. Временная зависимость инверсности КТ, взаимодействующей с когерентным полем: *a* – $\xi = 0,2$; *б* – $\xi = 0,49$; *в* – $\xi = 0,53$; *з* – $\xi = 1,2$; *д* – $\xi = 3,5$; *е* – $\xi = 40,0$

Появление двух колебательных режимов в ОР, разделенных точкой бифуркации при $\xi = 0,5$ предсказано в работах [7] для КТ, взаимодействующей с классическим электромагнитным полем постоянной интенсивности.

На рисунке 2 отображены результаты расчетов временной эволюции инверсности и среднего числа фотонов в поле, взаимодействующем с КТ: $\langle n(t) \rangle = \sum_n n (|A_n(t)|^2 + |B_n(t)|^2)$. Полагаем $\xi = 0,2$. Из рисунка видно, что мак-

симальным (минимальным) значениям инверсности соответствуют минимальные (максимальные) значения функции $\langle n(t) \rangle$, т. е. ОР соответствуют периодическому обмену фотонами внешнего поля между уровнями экситона в КТ. Следует отметить, что подобное поведение осцилляций полностью обусловлено наличием ло-

кального поля и не следует из стандартной модели Джейнса – Каммингса, в рамках которой в ОР возникают области инверсности с $w(t) = 0$, разделяющие области коллапса и возрождений (см. рис. 1, e) и которым соответствует $\langle n(t) \rangle = 0$.

Качественно зависимость на рис. 2 соответствует случаю взаимодействия идеальной двухуровневой атомной системы с классическим полем при наличии расстройки [4].

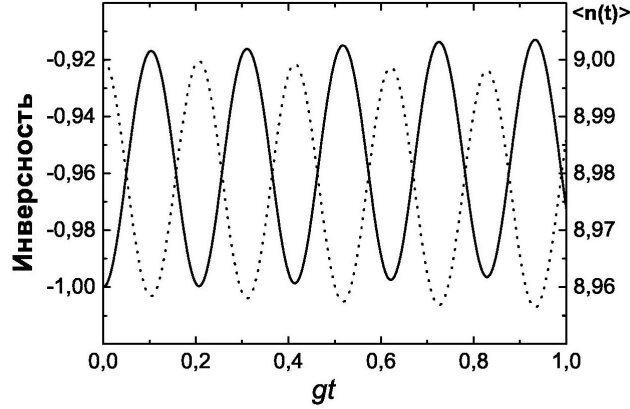


Рис. 2. Временные зависимости инверсии (сплошная линия) и среднего числа фотонов (пунктирная линия) в когерентном поле, взаимодействующем с КТ, при $\xi = 0.2$

Для сферической CdSe КТ радиуса $R \approx 3$ нм и дипольным моментом 15 Дебай оценка для параметра локального поля составляет $\hbar\Delta\omega \approx 8$ мэВ, которое соответствует значению $\hbar\Omega_{\langle n \rangle} \approx 4$ мэВ для случая $\xi_b = 0.5$. Подобное расщепление Раби наблюдаемо в экспериментах по спектроскопии одиночных КТ [10].

Колебательный режим при значениях $\xi > 40$ возникает вследствие «одевания» уровней системы фотонами внешнего поля [4]. Для объяснения возникновения колебаний при $\xi < 0.5$ рассмотрим макроскопическую поляризацию после окончания взаимодействия КТ с полем излучения ($g = 0$). Волновая функция системы в данном случае факторизуется, что позволяет найти аналитическое решение уравнений (5) в виде $A_n(t) = C_n A(t)$ и $B_n(t) = C_n B(t)$, где C_n – произвольные постоянные, удовлетворяющие условию нормировки $|A_n(t)|^2 + |B_n(t)|^2 = 1$. Тогда система (5) преобразуется к виду

$$i \frac{dA}{dt} = \Delta\omega A |B|^2, \quad i \frac{dB}{dt} = \Delta\omega B |A|^2, \quad (6)$$

позволяющему найти аналитическое решение:

$$A(t) = a_0 \exp[-i\Delta\omega |b_0|^2 t], \quad B(t) = b_0 \exp[-i\Delta\omega |a_0|^2 t]. \quad (7)$$

В данных выражениях $a_0 = A(0)$, $b_0 = B(0)$ – произвольные коэффициенты, удовлетворяющие условию $|a_0|^2 + |b_0|^2 = 1$. Данные величины определяют со-

стояние экситона в КТ после окончания взаимодействия. Решения (6) описывают в КТ квазичастицу с волновой функцией $|\tilde{\psi}(t)\rangle = A(t)|e\rangle + B(t)|g\rangle$, движение которой, как следует из (7), является коррелированным. Инверсность $w = |A|^2 - |B|^2$ в общем случае сохраняется во времени. Отметим, что в [6] для скорости Γ распада экситона, в КТ получена оценка: $\Delta\omega \gg \Gamma$. Таким образом, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ является стабильным состоянием в диапазоне $1/\Delta\omega \ll t \ll 1/\Gamma$.

Для выяснения физического смысла решений (6), рассмотрим макроскопическую поляризацию КТ, определяемую выражением

$$\langle \hat{P} \rangle = \frac{1}{V} \mu \langle b^+ \rangle + \text{к.с.} = \frac{1}{V} \mu a_0 b_0^* e^{-i(\omega_0 - \delta')t} + \text{к.с.}, \quad (8)$$

в котором параметр $\delta' = \Delta\omega w$ является самоиндуцированной расстройкой, зависящей от инверсности, т. е. от состояния экситона в КТ и от деполяризационного сдвига. Большие значения δ' приводят к появлению осцилляций Раби малых амплитуд, что подтверждается экспериментально [8]. Качественно это позволяет объяснить зависимости, представленные на рис. 1, а, б и рис. 2. Следует отметить, что подобное поведение ОР возникает и при нерезонансном взаимодействии ($\delta \neq 0$) атомной системы с классическими полями.

Из выражения (8) следует также, что коррелированное движение электрона и дырки, образующих экситон, приводит к возникновению неизохронизма ОР, т. е. зависимости частоты осцилляций от амплитуды, что также наблюдалось в [8].

Рассмотрим теперь взаимодействие одиночной КТ с материальными параметрами, указанными выше, с гауссовым импульсом $E(t) = E_p \exp[-(t/\tau_p)^2]$, где E_p – пиковая напряженность импульса и τ_p его длительность. На рис. 3 отображены результаты расчета зависимости конечного состояния населенности возбужденного состояния экситона в КТ $f_c(t_0) = |A(t_0)|^2$ (получаемого из решения системы (2)) после прохождения импульса, при $t_0 = 0.5\tau_p$, от площади импульса

$$\Theta = \int_{-\infty}^{\infty} \Omega_R(t') dt' \text{ для различных значений } \tau_p. \text{ Данная величина измеряема в спек-$$

троскопии одиночных квантовых точек (см., например, [3]).

Известно, что зависимость финального состояния инверсности идеальной двухуровневой системы от площади импульса в режиме точного синхронизма описывается выражением $f_c(t_0) = \cos \Theta$, что отображено на рис. 3, а пунктирной линией. Расчеты показывают, что при $\tau_p = 0.5$ пкс локальные поля приводят к небольшой перенормировке площади импульса, при которой возникают максимумы и минимумы осцилляций Раби (рис. 3, а (сплошная кривая)). Данное поведение значительно изменяется с увеличением длительности импульса. При $\tau_p = 3.0$ пкс (рис. 3, б) учет локального поля приводит к сдвигу первого максимума осцилляций Раби в область более высоких интенсивностей падающего поля,

а именно к $\Theta = 3.4\pi$. При этом осцилляции Раби обнаруживают ступенчатую зависимость от площади импульса, а также проявляются области, в которых $f_c(t_0) = 0$. Эффект ступенчатой зависимости становится более ярко выраженным при дальнейшем увеличении длительности импульса: при $\tau_p = 5$ пкс, первый максимум возникает при $\Theta = 6.2\pi$ (рис.3, в).

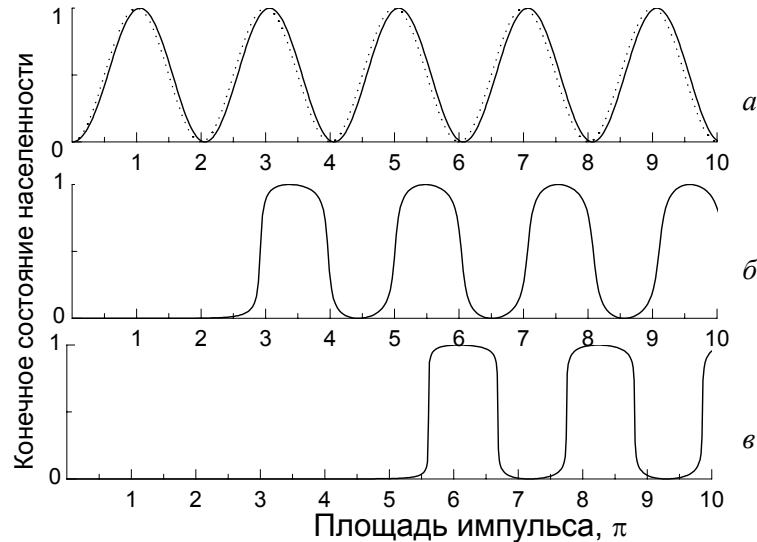


Рис. 3. Зависимость конечного состояния инверсии от площади импульсов различной длительности: а – 0.5 пкс; б – 3.0 пкс; в – 5.0 пкс

Эффект ступенчатых переходов можно использовать для выполнения логических операций. Вследствие того, что система имеет два устойчивых состояния – «0» и «1», путем воздействия оптического возбуждения можно осуществлять управление ее переходами между данными состояниями, что открывает возможность использования квантовой точки в качестве оптического переключателя. Существенное преимущество использования данного эффекта для логических операций заключается в следующем. В традиционном явлении Раби, в котором инверсия системы изменяется по гармоническому закону, для переключения системы из одного состояния в другое необходимо использование импульсов, площадь которых точно кратна π . Это видно также из рис. 3, а. Создание подобных полей является довольно трудной задачей. Эффект локального поля значительно уменьшает точность площади импульса, необходимую для переключения системы между состояниями.

Таким образом, в настоящей работе показано, что в осцилляциях инверсии КТ, взаимодействующей с когерентным полем, возникают два принципиально различных колебательных режима, разделенных точкой бифуркации. В первом колебательном режиме инверсия является периодической функцией времени. При этом явление коллапса – возродений отсутствует. Во втором режиме происходит возникновение коллапса и областей возрождения инверсии, однако они

значительно отличаются от предсказываемых классической моделью Джейнса – Каммингса для атомных систем. Для экситона КТ, взаимодействующей с гауссовым импульсом, зависимость населенности уровней от площади импульса обнаруживает ступенчатую зависимость.

Литература

1. *Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N.* Quantum Dot Heterostructures. 1999.
2. Single Quantum Dots, Topics of Applied Physics. 2003.
3. *Kamada H., Gotoh H.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 246401.
4. *Stievater T.H., Xiaoqin L. I.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 133602.
5. *Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum Optics. 2001.
6. *Meunier T.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 010401
7. *Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A.* et al. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 063804.
8. *Slepyan G. Ya., Magyarov A.* et al. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 045320; *Slepyan G. Ya., Magyarov A.* et al. // Phys. Stat. Sol. C. 2005. Vol. 2. № 2. P.850.
9. *Mitsumori Y., Hasegawa A.* et al. // Phys. Rev. B. 2005. Vol.71. P. 233305.
10. *Jaynes E. T., Cummings F. W.* // Proc. IEEE, 1963, Vol. 51. P.89.
11. *Khitrova G., Gibbs H. M.* et al. // Rev. of Modern Phys. 1999. Vol. 7. P.1591.

THE LOCAL FIELD INFLUENCE ON SIGNATURES OF EXCITONIC RABI OSCILLATIONS IN AN ISOLATED QUANTUM DOT DRIVEN BY THE COHERENT LIGHT FIELD

A. V. Magyarov

The local field influence on the excitonic Rabi oscillations in single the quantum dot driven by classical and quantum fields has been theoretically investigated. In particularly it has been shown that for the case of the coherent state excitation, in dependence on the strength of the incident field, two completely different oscillatory regimes separated by the bifurcation are inherent to the Rabi effect. In the first regime Rabi oscillations are periodic and do not reveal collapse-revivals phenomenon, while in the second one collapse and revivals appear.

ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ ВБЛИЗИ ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

А. М. Немиленцев

Плотность фотонных состояний – фундаментальная физическая величина, которая определяет такие физические эффекты, как силы Казимира [1], эффект Парселла [2], тепловое излучение [3, 4] и др. Структура плотности состояний определяется геометрией и свойствами материала рассматриваемой системы. В настоящее время наиболее эффективными средами для управления плотностью состояний являются микрополости, фотонные кристаллы и системы, поддерживающие распространение поверхностных волн [2, 3]. Однослойная углеродная нанотрубка (УНТ) является очень перспективной системой для этих целей, так как она поддерживает распространение сильно замедленных поверхностных плазмонов [5]. Более того, сильное увеличение скорости спонтанного распада возбужденного атома, помещенного в окрестности бесконечно длинной УНТ, по сравнению со скоростью спонтанного распада атома в свободном пространстве, предсказанное в [2], позволяют сделать вывод о сильном влиянии УНТ на структуру плотности состояний в ее окрестности. Однако модель бесконечно длинной УНТ не позволяет исследовать влияние краев УНТ на распределение плотности состояний. Целью данной статьи является построение модели тензора Грина УНТ конечной длины и исследование влияния краев УНТ на распределение плотности фотонных состояний.

Рассмотрим УНТ конечной длины L и радиуса R_{cn} , геометрический центр УНТ расположен в начале декартовой системы координат, а ее ось ориентирована вдоль оси z . При рассмотрении мы будем учитывать только осевую компоненту тензора проводимости УНТ σ_{zz} , предполагая, что все остальные компоненты тензора проводимости пренебрежимо малы [5].

Согласно флуктуационно-диссипативной теореме, плотность фотонных состояний $\rho(\mathbf{r}, \omega)$ вблизи немагнитной УНТ может быть выражена через электрический тензор Грина $\underline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)$ следующим образом [3, 6]:

$$\rho(\mathbf{r}_1, \omega) = \frac{\omega}{4\pi^2 c^2} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[\underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \frac{c^2}{\omega^2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \times \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2} \times \right]_{\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2} \right\}. \quad (1)$$

Тензор Грина является решением волнового уравнения с дельта-источником тока в правой части:

$$(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 4\pi \underline{I} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где $\underline{I}$ – единичный тензор. Его решение в общем случае может быть представлено в виде суммы двух компонент:

$$\underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) + \underline{G}^{(\text{scat})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega), \quad (3)$$

где $\underline{G}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = (\underline{I} + k^{-2} \nabla_{\mathbf{r}_1} \otimes \nabla_{\mathbf{r}_1}) G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ – тензор Грина свободного пространства, $G^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \exp(ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, $\underline{G}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ – модификация тензора Грина свободного пространства вследствие его рассеяния на УНТ. Модифицированный тензор Грина удовлетворяет однородному волновому уравнению

$$(\nabla_{\mathbf{r}_1} \times \nabla_{\mathbf{r}_1} \times - k^2) \underline{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = 0 \quad (4)$$

и эффективным граничным условиями на поверхности УНТ [5].

В декартовой системе координат уравнение (2) может быть разделено на три независимых уравнения, каждое из которых описывают эволюцию одного из столбцов тензора Грина. Следовательно, любой столбец β тензора Грина можно формально рассматривать как векторное поле, индуцированное в точке $\mathbf{r}_1$ дельта-источником тока, расположенным в точке $\mathbf{r}_2$ и поляризованным вдоль базисного вектора $\mathbf{e}_\beta$ декартовой системы координат. Таким образом, задача о нахождении тензора Грина $G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ сводится к задаче рассеяния векторного поля $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ на УНТ для трех различных поляризаций дельта-источника тока $\mathbf{e}_\beta$, $\beta = x, y, z$. Для решения уравнения (4) мы сводим его к интегральному уравнению для плотности тока, индуцированной на поверхности УНТ падающим полем $G_{z\beta}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$, используя теорему Грина и граничные условия на поверхности УНТ [5]. Интегральное уравнение имеет следующий вид:

$$\int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z', \mathbf{r}_2) K(z - z') dz' + C_1 e^{-ikz} + C_2 e^{ikz} = \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{ik|z-z'|}}{2ik} \int_0^{2\pi} G_{z\alpha}^{(0)}(\mathbf{R}', \mathbf{r}_2, \omega) dz' d\varphi', \quad (5)$$

где константы C_1, C_2 определяются из краевых условий $j_z^{(m)}(\pm L/2; \mathbf{r}_2) = 0$,

$$K(z) = \frac{e^{ik|z|}}{2ik\sigma_{zz}(\omega)} - \frac{2iR_{cn}}{\omega} \int_0^\pi \frac{e^{ikr}}{r} d\varphi, \quad (6)$$

$r = \sqrt{z^2 + 4R_{cn}^2 \sin^2(\varphi/2)}$. Зная индуцированную плотность тока, можно легко вычислить рассеянную часть тензора Грина:

$$G_{\alpha\beta}^{(scat)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) = \frac{i\omega R_{cn}}{c^2} \int_{-L/2}^{L/2} j_z^{(\alpha)}(z; \mathbf{r}_2) \int_0^{2\pi} G_{\beta z}^{(0)}(\mathbf{r}_1, R, \omega) dz d\varphi. \quad (7)$$

Уравнения (5) – (7) играют роль уравнения Дайсона для тензора Грина однослойной углеродной нанотрубки конечной длины. Следует отметить, что в данном случае рассеяние не сводится к незначительным поправкам к тензору Грина свободного пространства и поэтому уравнение Дайсона нельзя решить в борновском приближении. Для преодоления этих трудностей численный метод решения данного уравнения был развит. Он основывается на аппроксимации интегралов квадратурными формулами с последующим сведением интегрального уравнения к системе матричных уравнений.

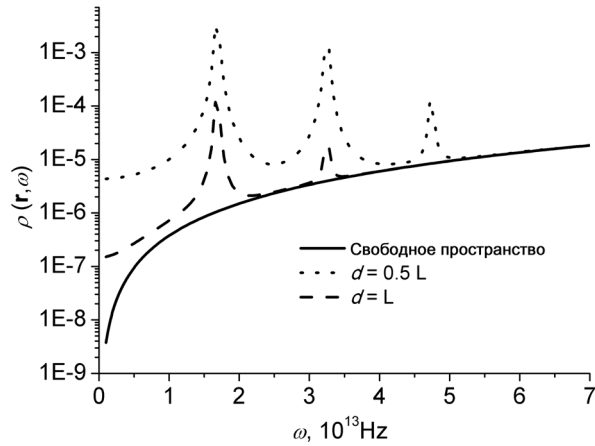


Рис. 1. Плотность фотонных состояний в свободном пространстве и в окрестности однослойной металлической (15, 0) УНТ длины $L = 1$ мкм. Вычисления проводились для точек, расположенных в плоскости $z = 0$ на расстоянии d от оси нанотрубки

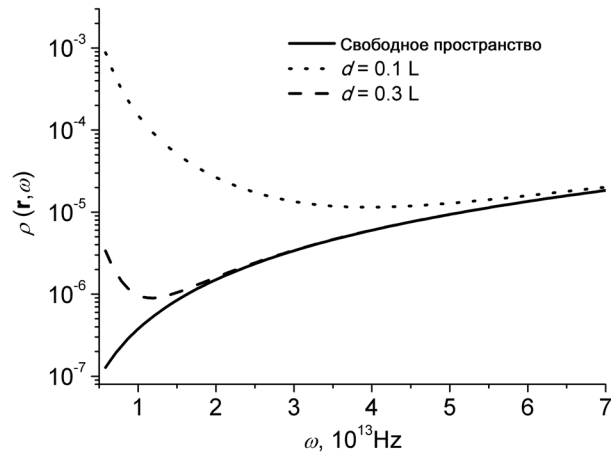


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для полупроводниковой (23,0) УНТ

На рисунках 1, 2 представлены результаты вычислений плотности фотонных состояний для металлической (15, 0) и полупроводниковой (23, 0) УНТ. Из рисунков видно, что спектральная структура плотности фотонных состояний вблизи УНТ сильно меняется по сравнению со случаем свободного пространства. Причины данных изменений состоят в том, что наряду со свободными фотонами появляются фотонные состояния, связанные с сильно замедленными плазмонами на поверхности УНТ. Наиболее существенные изменения наблюдаются в спектре металлической УНТ: спектр плотности состояний имеет резонансный характер. Эти резонансы возникают вследствие геометрических резонансов поверхностных плазмонов на краях УНТ. Следует отметить, что эти резонансы

сильно сдвинуты в терагерцовую область по сравнению с резонансами, которые можно было бы ожидать для случая идеально проводящего цилиндра. Причина данного сдвига – сильное замедление поверхностных плазмонов в УНТ (коэффициент замедления ~ 200). Вблизи полупроводниковых УНТ поведение плотности фотонных состояний также качественно отличается от случая свободного пространства: в то время как плотность фотонных состояний свободного пространства уменьшается с уменьшением частоты, плотность фотонных состояний вблизи УНТ возрастает.

Отсутствие ярко выраженных резонансов в спектрах фотонной плотности состояний вблизи полупроводниковых УНТ можно объяснить более сильным затуханием поверхностных плазмонов в полупроводниковых УНТ по сравнению с металлическими УНТ. Следует отметить, что влияние нанотрубки на плотность фотонных состояний быстро уменьшается с удалением от поверхности УНТ, что подтверждает тезис о существенном влиянии поверхностных возбуждений на перераспределение плотности фотонных состояний.

Таким образом, в данной работе было исследовано влияние УНТ на плотность фотонных состояний. Для этого была разработана методика вычисления тензора Грина однослойной УНТ конечной длины. Результаты вычислений показали, что плотность фотонных состояний вблизи УНТ существенно отличается от плотности фотонных состояний в свободном пространстве. В частности, резонансы в спектре плотности фотонных состояний вблизи металлической УНТ были обнаружены. Природа данных резонансов – резонансы поверхностных плазмонов на краях УНТ, что отражает существенную роль краевых эффектов в данном случае. Результаты, представленные в данной работе, позволяют сделать вывод о том, что эффекты, связанные с плотностью фотонных состояний (эффект Казимира, эффект Парселла и др.), вблизи УНТ будут иметь нетривиальный характер.

Литература

1. Bordag M., Mohideen U., Mostepanenko V. M. // Phys. Rep. 2001. Vol. 353. P. 1.
2. Bondarev I. V., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. // Phys. Rev. Let. 2002. Vol. 89. P. 115504
3. Joulain K., Mulet J.-P. et al. // Surf. Sci. Rep. 2005. Vol. 57. P. 59.
4. Nemilentsau A. M., Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. // Phys. Rev. Let. 2007. Vol. 99. P. 147403
5. Slepyan G. Ya., Maksimenko S. A. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136.
6. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика: теория конденсированного состояния. 1978.

PHOTONIC DENSITY OF STATES IN THE VICINITY OF THE SINGLE-WALL FINITE-LENGTH CNT

A. M. Nemilentsau

In this article the modification of the photonic density of states in vicinity of the single-wall finite-length carbon nanotube is investigated. The method of the finite-length nanotube Green tensor calculation is elaborated to calculate the photonic density of states. The strong influence of the CNT on the photonic density of states in the near-field zone is demonstrated. In particular, the resonance structure of the photonic density of states spectrum in the vicinity of the metallic CNT is demonstrated thus revealing the strong influence of the edge effects on the photonic density of states redistribution.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЪЕМНОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ С СЕТОЧНЫМ РЕЗОНАТОРОМ

В. Г. Барышевский, Н. А. Белоус, А. А. Гуринович, В. А. Евдокимов, А. С. Лобко, П. В. Молчанов, А. В. Оськин, В. И. Столярский

Генерация объемного лазера на свободных электронах (ОЛСЭ) с сеточным фотонным кристаллом, созданным из натянутых металлических нитей, была исследована в режиме лампы обратной волны. Исследования порога генерации были проведены для различных сеточных фотонных кристаллов и получена зависимость порога генерации от длины фотонного кристалла.

1. Введение

В настоящее время широко распространены генераторы, использующие излучение электронного пучка в периодической замедляющей структуре (лампы бегущей волны, лампы обратной волны, лазеры на свободных электронах) [1]. Дифракционное излучение [2] в периодической структуре лежит в основе работы лампы бегущей волны [3, 4], лампы обратной волны и лазеров, использующих излучение Смит – Парсела [5–7], а также объемных лазеров на свободных электронах, использующих двух- или трехмерную распределенную обратную связь [8–11]. Использование смит-парселовских лазеров и подобных им устройств ограничено необходимостью точной проводки электронного пучка над замедляющей структурой (электронный пучок должен проходить на расстоянии $\delta \leq \frac{\lambda\beta\gamma}{4\pi}$ над дифракционной структурой, здесь λ – длина волны излучения, $\beta = v/c$, где v – скорость электронного пучка, γ – Лоренц-фактор). Электрическая стойкость резонатора ограничивает мощность излучения и ток электронного пучка. Длина волны излучения обычных волноводных систем существенно ограничивается требованием на поперечные размеры резонатора, которые не могут существенно превосходить длину волны.

Большая часть указанных проблем может быть преодолена в ОЛСЭ [8–12]. В ОЛСЭ благодаря объемному характеру взаимодействия с электромагнитной волной взаимодействует большая часть электронного пучка. Поперечные размеры резонатора ОЛСЭ могут существенно превосходить длину волны $D \gg \lambda$. Кроме того, электронный пучок и мощность излучения распределены по всему объему, что улучшает электрическую прочность системы. Один из типов ОЛСЭ [11] может быть создан на основе объемного сеточного резонатора (сеточного фотонного кристалла), который образован периодически натянутыми диэлектрическими или металлическими нитями. Сеточная структура из диэлектрических

нитей была исследована в [13], где было продемонстрировано, что добротность такого фотонного кристалла может быть достаточно высокой (10^4 – 10^6).

Теоретический анализ [14, 16] показал, что в диапазоне длин волн, в котором толщина скин-слоя меньше радиуса металлической нити, периодическая металлическая сетка слабо поглощает электромагнитное излучение и сеточный фотонный кристалл из металлических нитей оказывается почти прозрачным для такого излучения. Выводы, сделанные в [14], позволили обосновать возможность создания ОЛСЭ с сеточным фотонным кристаллом из металлических нитей.

Первая генерация ОЛСЭ с сеточным фотонным кристаллом из металлических нитей была получена в эксперименте [15] в полном соответствии с выводами [14].

В настоящем сообщении исследуется зависимость интенсивности генерируемого излучения от длины фотонного кристалла в режиме лампы обратной волны.

2. Концепция

Распространение волн через фотонные кристаллы является предметом многочисленных исследований [17–20].

Существует ряд трудностей, возникающих при рассмотрении взаимодействия электромагнитной волны с фотонным кристаллом из металлических нитей. Хорошо известно, что металлическая сетка хорошо отражает электромагнитные волны, поэтому возникает вопрос, будет ли волна проникать в резонатор, внутри которого помещен набор металлических сеток (см. рис. 1). Теоретический анализ [14, 16] показал, что фотонный кристалл из металлических нитей не поглощает электромагнитные волны и почти прозрачен в диапазоне частот от гигагерц до терагерц. В этом диапазоне глубина скин-слоя δ для большинства металлов составляет не больше нескольких микрон (например, для 10 ГГц $\delta_{Cu} = 0.66$ мкм, $\delta_{Al} = 0.8$ мкм, $\delta_W = 1.16$ мкм и т. д.), поэтому металлические нити могут рассматриваться как идеально проводящие.

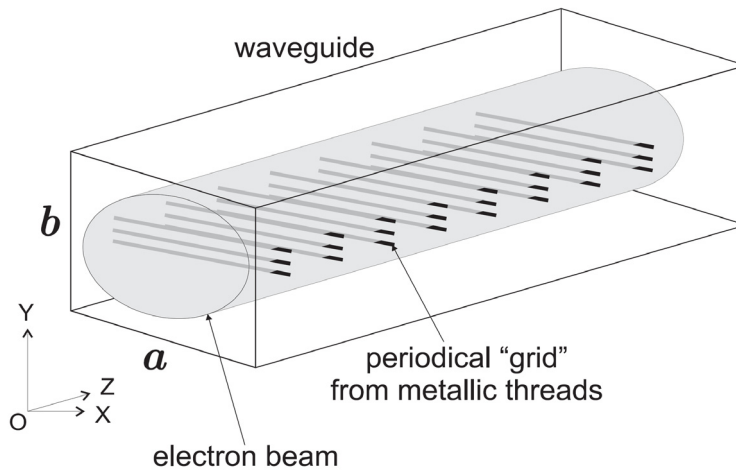


Рис. 1. Сеточный фотонный кристалл

В соответствии с работами [14, 16] показатель преломления фотонного кристалла можно записать в виде

$$n_{\parallel(\perp)}^2 = 1 + \frac{\eta_{\parallel(\perp)}}{k^2}, \quad (1)$$

где

$$\eta_{\parallel(\perp)} = \frac{4\pi}{\Omega_2} \frac{A_0}{1 + i\pi A_0 - 2CA_0}, \quad (2)$$

$n_{\parallel}$ и $n_{\perp}$ – показатели преломления для волн с поляризацией, параллельной и перпендикулярной оси нити соответственно; $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число; R – радиус нити; $\Omega_2 = d_y \cdot d_z$, где d_y и d_z – период фотонного кристалла вдоль оси y и z соответственно, $C = 0.5772$ константа Эйлера. Величины $A_{0(\parallel)}$ и $A_{0(\perp)}$ для идеально проводящего цилиндра определены в [15, 16]:

$$\begin{aligned} A_{0(\parallel)} &= \frac{1}{\pi} \frac{J_0(kR)N_0(kR)}{J_0^2(kR) + N_0^2(kR)} + \frac{i}{\pi} \frac{J_0^2(kR)}{J_0^2(kR) + N_0^2(kR)}, \\ A_{0(\perp)} &= \frac{1}{\pi} \frac{J_0'(kR)N_0'(kR)}{J_0'^2(kR) + N_0'^2(kR)} + \frac{i}{\pi} \frac{J_0'^2(kR)}{J_0'^2(kR) + N_0'^2(kR)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где J_0, N_0, J_0' и N_0' – функции Бесселя и Неймана и их производные соответственно.

Для описания нитей с конечной проводимостью следует пользоваться выражениями:

$$\begin{aligned} A_{0(\parallel)} &= \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R)J_0'(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R)J_0(kR)}{J_0(k_t R)H_0^{(1)'}(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R)H_0^{(1)}(kR)}, \\ A_{0(\perp)} &= \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R)J_0'(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R)J_0(kR)}{J_0(k_t R)H_0^{(1)'}(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R)H_0^{(1)}(kR)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где ε_t – диэлектрическая проницаемость материала нити, $k_t = \sqrt{\varepsilon_t} k$, $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля нулевого порядка. Выражения (3) могут быть получены из (4) при $\varepsilon_t \rightarrow \infty$.

Разница в показателях преломления для волн с разной поляризацией ($n_{\parallel} \neq n_{\perp}$) свидетельствует о том, что система обладает оптической анизотропией (т. е. двулучепреломлением и дихроизмом). Устранить эту анизотропию можно, чередуя положение нитей в фотонном кристалле, т. е. расположив нити в каждом слое ортогонально нитям в предыдущем и последующем слоях.

Излучение Смит – Парсела (дифракционное излучение) возникает при прохождении электронного пучка через фотонный кристалл при выполнении условия

$$\omega - \vec{k}n(k)\vec{v} = \vec{\tau}\vec{v}, \quad (5)$$

где $\vec{v}$ – скорость электронного пучка, $\vec{\tau}$ – вектор обратной решетки фотонного кристалла и $n(k)$ – показатель преломления (см. выражение (1)). Пусть вектор скорости электронного пучка направлен вдоль оси OZ , тогда (5) можно записать в виде

$$k - \tau_z \beta = k n(k) \beta \cos \theta, \quad (6)$$

где $\beta = \frac{v}{c}$, угол между $\vec{k}$ и скоростью электронного пучка θ , $\tau_z = \frac{2\pi m_h}{d_z}$, а $m_h = 1, 2, \dots$ номер гармоники. Корни этого уравнения определяют спектр частот дифракционного излучения, возникающего при движении электрона в фотонном кристалле.

Согласно [14, 16], дифракционное излучение в металлическом волноводе прямоугольного сечения с сеточным фотонным кристаллом внутри описывается уравнением, подобным (6):

$$\left(\frac{\omega - \tau_z v}{v}\right)^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\kappa_{mn}^2 - \eta), \quad (7)$$

где η определяется выражением (2), а собственные значения κ_{mn} определяются поперечными размерами волновода (ширина a и высота b):

$$\kappa_{mn}^2 = \left(\frac{\pi m}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi n}{b}\right)^2. \quad (8)$$

Корни уравнения (7) для $\frac{\eta}{\tau_z^2 \beta^2} \ll 1$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \omega_1(m, n) &= \frac{\tau_z v}{1 - \beta^2} \left(1 - \beta \sqrt{1 - \frac{(\kappa_{mn}^2 - \eta) (1 - \beta^2)}{\tau_z^2 \beta^2}} \right), \\ \omega_2(m, n) &= \frac{\tau_z v}{1 - \beta^2} \left(1 + \beta \sqrt{1 - \frac{(\kappa_{mn}^2 - \eta) (1 - \beta^2)}{\tau_z^2 \beta^2}} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь уместно вспомнить, что $\tau_z = \frac{2\pi m_h}{d_z}$, где $m_h = 1, 2, \dots$ номер гармоники. Из (9) следует, что чем выше номер гармоники, тем выше частота излучения. Например, для электронного пучка с энергией 200 кэВ при $\theta \sim 20^\circ$ и $d_z = 1.6$ см частоты излучения, соответствующие первой гармонике ($m_h = 1$), определяются двумя корнями выражения (7) – это 10 ГГц и 40 ГГц соответственно, а для 30-й гармоники ($m_h = 30$) эти частоты: 230 ГГц и 1 ТГц.

3. Экспериментальная установка

Сеточный фотонный кристалл был изготовлен из вольфрамовых нитей диаметром 100 мкм, натянутых в волноводе прямоугольного сечения с поперечными размерами $a = 35$ мм, $b = 35$ мм и длиной 300 мм (см. рис. 1).

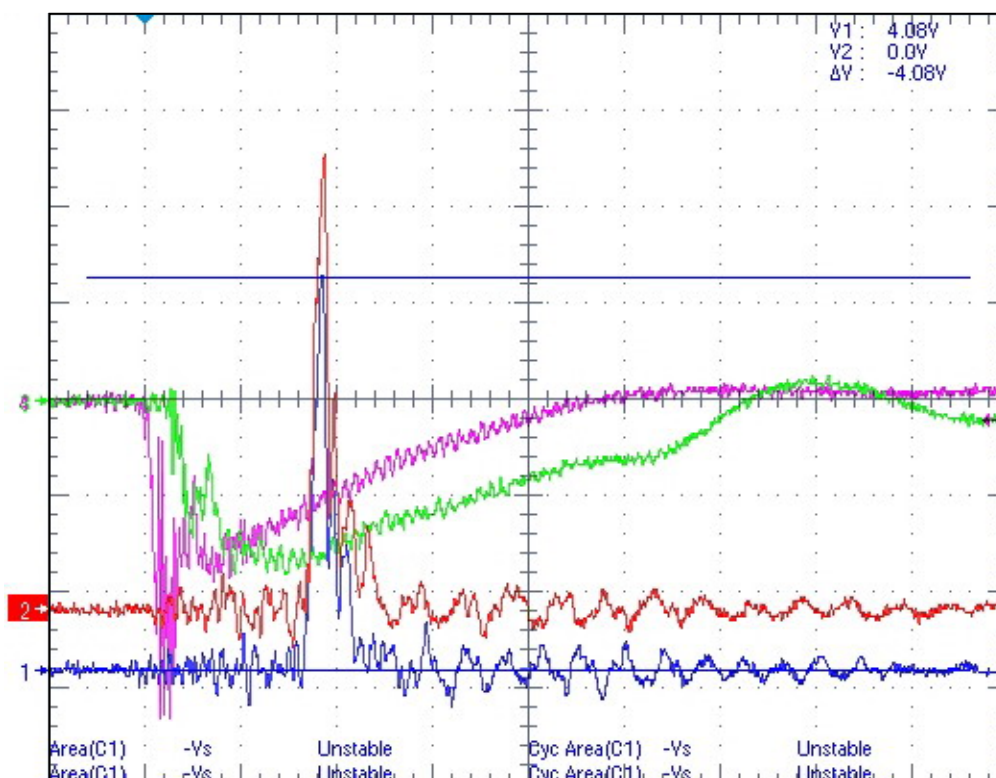


Рис. 2. Пример полученной осциллограммы

Расстояние между нитями в направлении OZ составляло $d_z = 12.5$ мм, выбранный период обеспечивал излучение на частоте ~ 8.4 ГГц. Электронный пучок диаметром 32 мм с энергией электронов ~ 200 кэВ и током ~ 2 кА проводился через сеточную структуру в магнитном поле $\sim 1.55 - 1.6$ Тл.

Сеточная структура была изготовлена в виде отдельных рамок, содержащих 1, 3 или 5 параллельных нитей, отстоящих друг от друга на расстояние $d_y = 6$ мм. Рамки были соединены таким образом, чтобы создать сеточную структуру с периодом d_z . Измерения частоты излучения проводились с использованием волноводных фильтров, перестраиваемых в диапазоне 7.8 – 12.4 ГГц с полосой пропускания 0.25 ГГц, 0.5 ГГц и 1 ГГц. Ослабление излучения в полосе непропускания фильтра ~ 25 дБ.

4. Результаты эксперимента

Целью эксперимента было изучение зависимости интенсивности генерируемого излучения от длины фотонного кристалла.

В этом эксперименте максимальная мощность излучения ОЛСЭ для 1 нити в рамке составляет 1.5 кВт, для 3 нитей – 5 кВт и 10 кВт для 5 нитей. Пример осциллограммы, полученной в эксперименте, приведен на рис. 2. Измери-

тельные каналы 1 и 2 использовались для регистрации формы СВЧ импульса в измерительном канале без фильтра (канал 1) и с частотным фильтром (канал 2), канал 3 для регистрации тока пучка и канал 4 напряжения на диоде. Шаг временной шкалы – 80 нс.

По экспериментальным осциллограммам был получен спектр излучения генератора ОЛСЭ, максимум спектра плотности мощности излучения находится в полосе 8.3–8.6 ГГц (рис. 3).

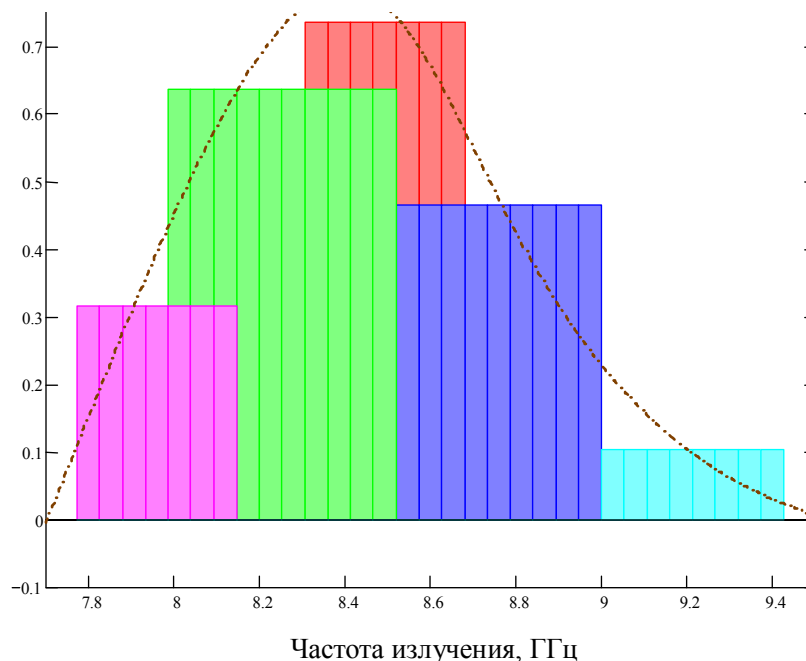


Рис. 3. Частотный спектр излучения ОЛСЭ

В ходе работ была получена зависимость частоты излучения от величины магнитного поля, магнитная перестройка частоты в полосе 8.0–8.9 ГГц. На рис. 4 представлены частотные кривые зависимости пиковой и средней мощности излучения импульса от величины ведущего магнитного поля для двух частотных диапазонов 8.0–8.45 ГГц и 8.45–8.9 ГГц. Максимальная мощность излучения была нормирована на единицу. Характерный минимум в области 1,7 Тл соответствует циклотронному поглощению обратной электромагнитной волны вращающимся электронным пучком.

Были проведены два типа экспериментов для исследования зависимости порога генерации от длины сеточного резонатора.

1. Была исследована зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла для структуры с одной нитью в рамке, равноотстоящей от верхней и нижней стенок волновода (рис. 5). Измерения были проведены для 4, 8, 10 и 24 рамок.

Результаты этих измерений приведены на рис. 6, где мощность излучения нормирована к максимальному значению мощности (1.5 кВт).

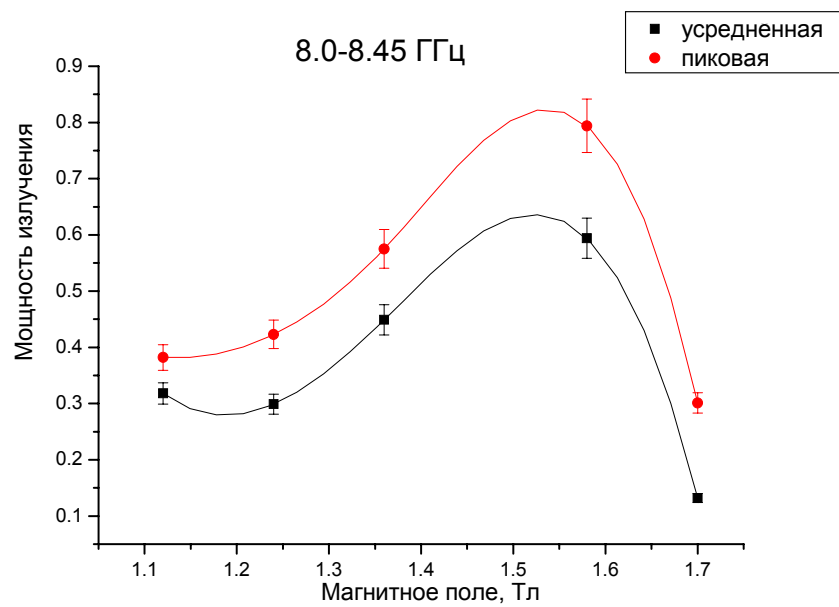
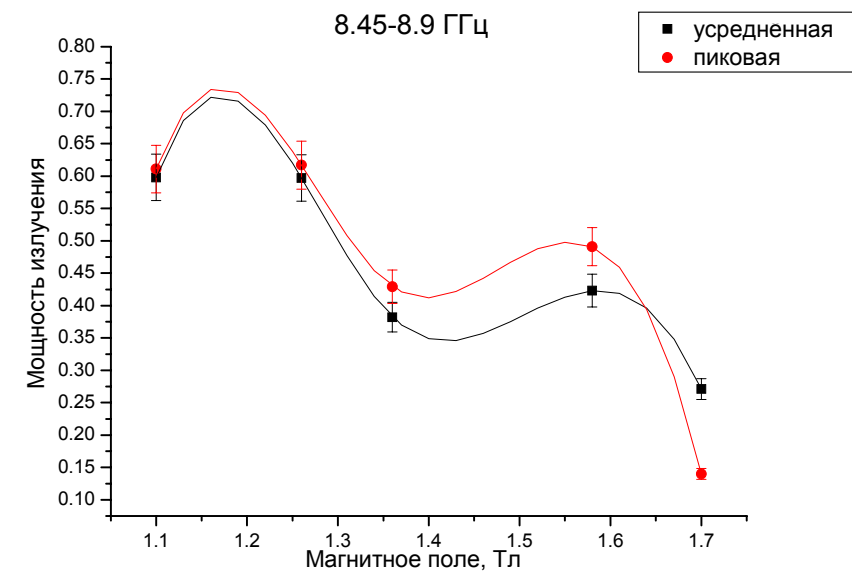


Рис. 4. Магнитная перестройка частоты излучения

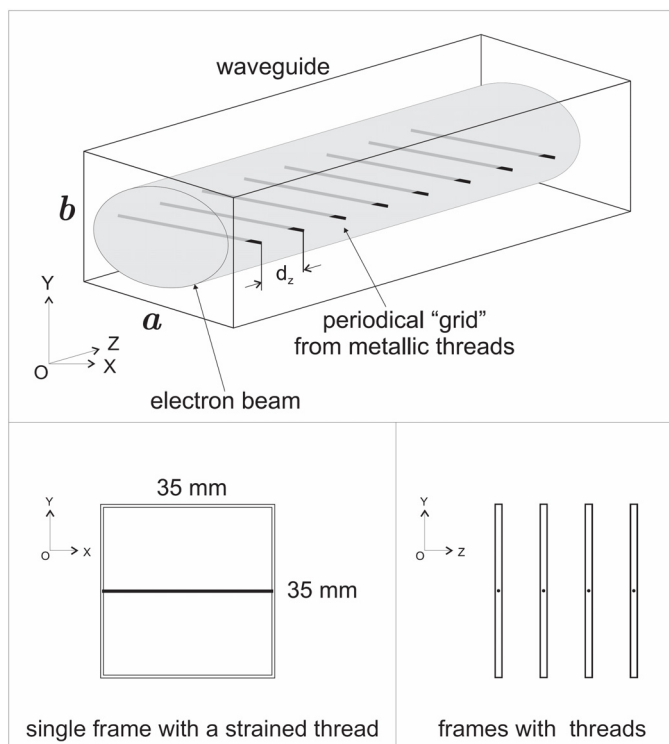


Рис. 5. Фотонный кристалл с одной нитью в рамке, равноотстоящей от верхней и нижней стенок волновода

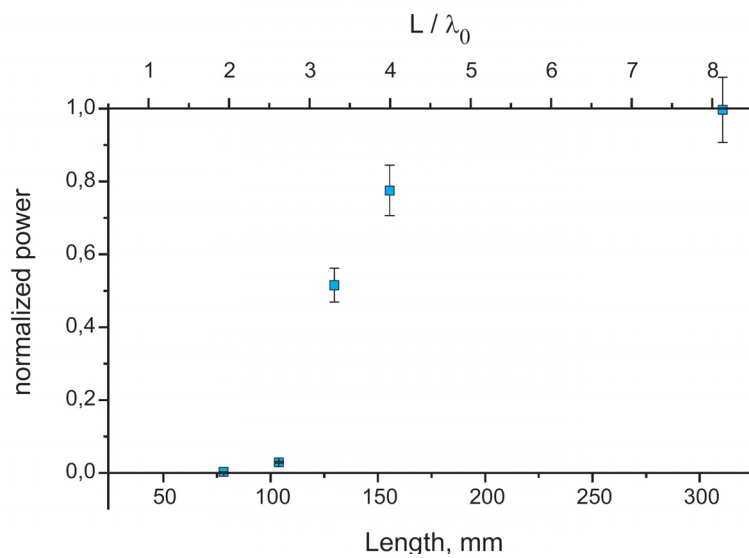


Рис. 6. Зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла с 1 нитью в рамке, верхняя шкала показывает длину кристалла в длинах волн L/λ_0 , где $\lambda_0 = 3.6$ см

2. Была исследована зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла для структуры с пятью нитями в рамке, отстоящими друг от друга на расстоянии $d_y = 6$ мм (рис. 7). Измерения были проведены для 4, 6, 10, 12, 14 и 22 рамок.

Результаты этих измерений приведены на рис. 8, где мощность излучения нормирована к максимальному измеренному значению мощности (10 кВт). Сплошная кривая на этом рисунке – результат численного моделирования.

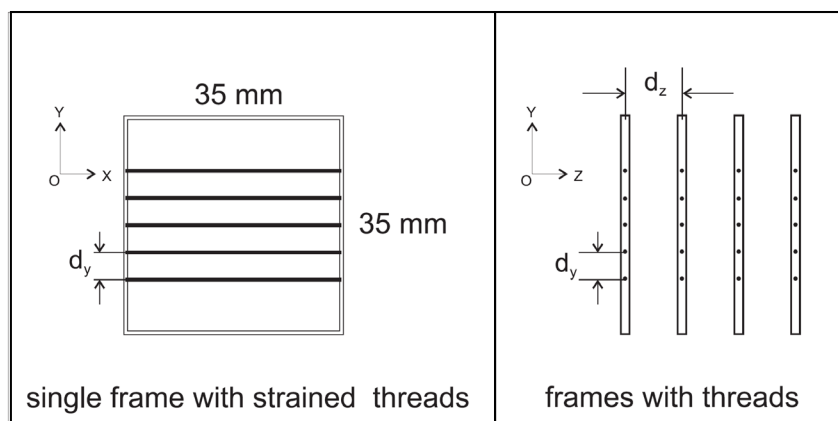


Рис. 7. Фотонный кристалл с пятью нитями в рамке, натянутыми на расстоянии $d_y = 6$ мм друг от друга

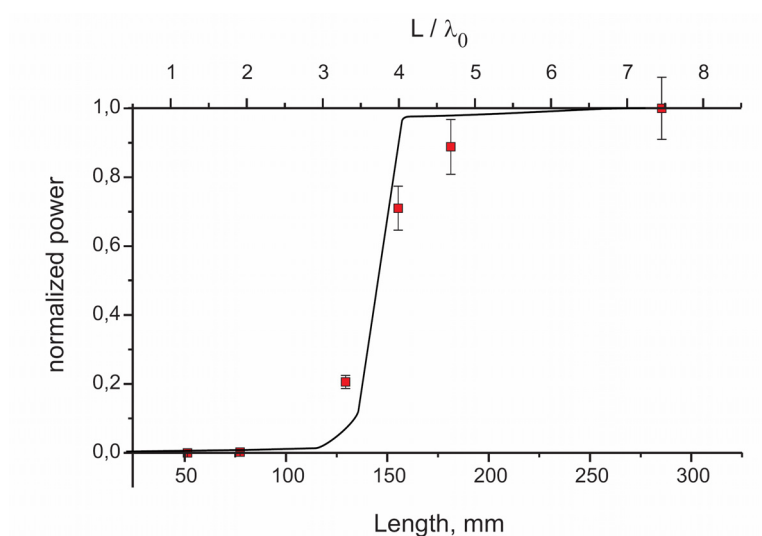


Рис. 8. Экспериментально измеренная зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла с 5 нитями в рамке показана точками и результат моделирования мощности излучения электронного пучка с энергией ~ 200 кэВ и плотностью тока ~ 2 кА/см² (сплошная кривая)

5. Заключение

Генерация объемного лазера на свободных электронах (ОЛСЭ) с сеточным фотонным кристаллом, созданным из натянутых металлических нитей, была исследована в режиме лампы обратной волны. Исследования порога генерации были проведены для различных сеточных фотонных кристаллов и получена зависимость порога генерации от длины фотонного кристалла. Использование объемных резонаторов описанного типа позволяет ослабить требования на форму электронного пучка и точность его проводки, поскольку в данной системе электронный пучок проходит непосредственно сквозь фотонный кристалл.

Литература

1. *Granatstein V. L., Parker R. K., Armstrong C. M.* // Proc. IEEE. 1999. Vol. 87. P. 5.
2. *Болотовский Б. М., Воскресенский Г. В.* // УФН. 1966. Vol. 88. P. 209.
3. *Kompfner R.* // Wireless World. 1946. Vol. 52. P. 369.
4. *Pierce R.* // Proc. IRE. 1947. Vol. 35. P. 111.
5. *Smith S. J., Purcell E. M.* // Phys. Rev. 1953. Vol. 92. P. 1069.
6. *Salisbury W. W.* // US Patent. 1953. 2,634,372; J. Opt. Soc. Am. 1970. Vol. 60. P. 1279.
7. *Doucas G., Mulvey J. H. et al.* // Phys.Rev.Lett. 1992. Vol. 69. P. 1761; *Walsh J. E.* // US Patent 1996. 5,790,585.
8. *Baryshevsky V. G.* // NIM. A. 2000. Vol. 445. P. 281; LANL e-print archive physics/9806039.
9. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 2002. Vol. 483. P. 21.
10. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 2003. Vol. 507. P. 137.
11. *Baryshevsky V. G. et al.* // Eurasian Patent no. 004665.
12. *Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D.* // Phys.Lett. A. 1984. 141.
13. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 1997. 71.
14. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // LANL e-print archive: physics/0409107.
15. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // LANL e-print archive physics/0409125.
16. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM B. 2006. Vol. 252. P. 92.
17. *Pokrovsky A. L., Efros A. L.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 045110.
18. *Pokrovsky A. L.* // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 195108.
19. *Smirnova E. I., Chen C. et al.* // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 91(3). P. 960.
20. *Smirnova E. I., Chen C.* // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93(10). P. 5859.
21. *James R. W.* The Optical Principles of Diffraction of X-Rays. 1982.
22. *Chang Shih-Lin.* Multiple diffraction of x-rays in crystals. 1984.
23. *Nikolsky V. V.* Electrodynamics and propagation of radio-wave. 1978.

EXPERIMENTAL STUDY OF A VOLUME FREE ELECTRON LASER WITH A "GRID" RESONATOR

**V. G. Baryshevsky, N. A. Belous, A. A. Gurinovich, V. A. Evdokimov,
A. S. Lobko, P. V. Molchanov, A. V. Oskin, V. I. Stolyarsky**

Operation of Volume Free Electron Laser with a "grid" photonic crystal, built from periodically strained metallic threads, was studied in the backward wave regime. Generation threshold was observed for different "grid" photonic crystals. Dependence of the generation threshold on the resonator length was investigated.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ С СЕТОЧНЫМ РЕЗОНАТОРОМ С ПЕРЕМЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В. Г. Барышевский, А. А. Гуринович

Рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами. Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

1. Введение

Дифракционное излучение [1] в периодических структурах лежит в основе работы лампы бегущей волны (ЛБВ) [2, 3], лампы обратной волны (ЛОВ) и таких устройств, как смит-парселовский лазер [4–6] и объемный лазер на свободных электронах [7–10].

Объемный лазер на свободных электронах (ОЛСЭ) – это генератор излучения, использующий неоднородную распределенную обратную связь, создаваемую брэгговскими дифракционными решетками или фотонным кристаллом.

Один из типов ОЛСЭ [11] может быть создан на основе объемного сеточного резонатора (сеточного фотонного кристалла), который образован периодически натянутыми диэлектрическими или металлическими нитями [1, 12, 13, 15].

В настоящей статье рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами.

Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

2. Теория генерации в ОЛСЭ с фотонным кристаллом с переменным периодом

Уравнения, описывающие генерацию ОЛСЭ с фотонным кристаллом (рис. 1), можно получить, рассмотрев систему уравнений Максвелла и уравнений движения для частицы в электромагнитном поле:

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad \text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \text{div} \vec{D} &= 4\pi\rho, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

здесь $\vec{E}$ и $\vec{H}$ – электрическое и магнитное поля, $\vec{j}$ и ρ – плотность тока и заряда, электромагнитная индукция $D_i(\vec{r}, t') = \int \varepsilon_{il}(\vec{r}, t-t') E_l(\vec{r}, t') dt'$ и, следовательно, $D_i(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_{il}(\vec{r}, \omega) E_l(\vec{r}, \omega)$, индексы $i, l = 1, 2, 3$ соответствуют осям x, y, z .

Плотность тока и заряда определяются выражениями:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = e \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t)), \quad \rho(\vec{r}, t) = e \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t)),$$

где e – заряд электрона, $\vec{v}_{\alpha}$ – скорость частицы α (α нумерует частицы пучка);

$$\frac{d\vec{v}_{\alpha}}{dt} = \frac{e}{m\gamma_{\alpha}} \left\{ \vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t) + \frac{1}{c} [\vec{v}_{\alpha} \times \vec{H}(\vec{r}_{\alpha}, t)] - \frac{\vec{v}_{\alpha}}{c^2} (\vec{v}_{\alpha} \vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t)) \right\},$$

здесь $\gamma_{\alpha} = (1 - \frac{v_{\alpha}^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}}$ – Лоренц-фактор, $\vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t)$ и $\vec{H}(\vec{r}_{\alpha}, t)$ – электрическое и магнитное поля в точке, где находится частица α , $\vec{r}_{\alpha} = \vec{r}_{\alpha}(t)$.

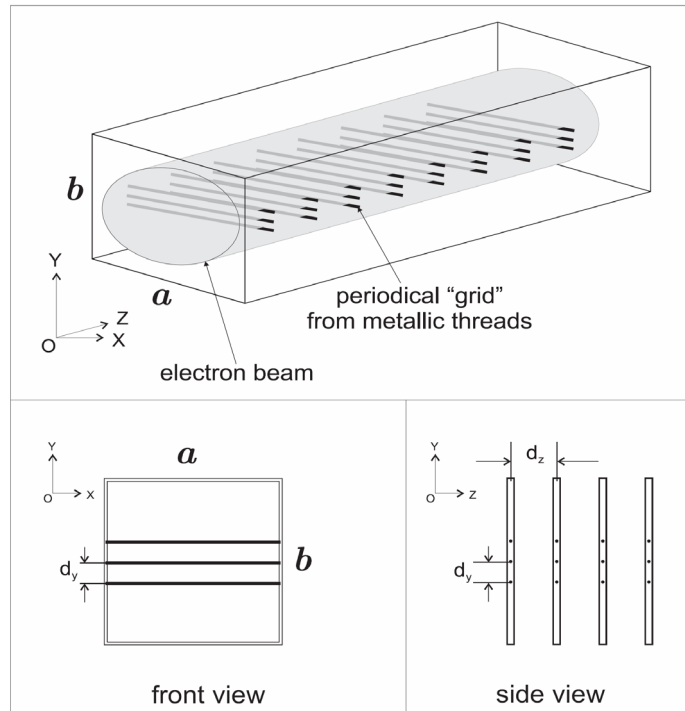


Рис. 1. Сеточный фотонный кристалл

Тензор диэлектрической проницаемости можно записать в виде $\hat{\varepsilon}(\vec{r}) = 1 + \hat{\chi}(\vec{r})$, где $\hat{\chi}(\vec{r})$ – диэлектрическая восприимчивость. При $\hat{\chi} \ll 1$ систему (1) можно записать:

$$\Delta \vec{E}(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int \hat{\varepsilon}(\vec{r}, t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = 4\pi \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right). \quad (2)$$

Для идеальной дифракционной решетки $\hat{\chi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{\tau}} \hat{\chi}_{\vec{\tau}}(\vec{r}) e^{i\vec{\tau}\vec{r}}$, где $\vec{\tau}$ – вектор обратной решетки [16, 17].

Пусть период дифракционной решетки (фотонного кристалла) плавно меняется на расстоянии, значительно превосходящем период дифракционной решетки (фотонного кристалла). В этом случае удобно представить восприимчивость $\hat{\chi}(\vec{r})$ в форме, в которой ее используют в теории дифракции рентгеновских лучей в искаженных кристаллах [18]:

$$\hat{\chi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{\tau}} e^{i\Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r})} \hat{\chi}_{\vec{\tau}}(\vec{r}), \quad (3)$$

где $\Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) = \int \vec{\tau}(\vec{r}') d\vec{l}'$, $\vec{\tau}(\vec{r}')$ – вектор обратной решетки вблизи точки $\vec{r}'$. Выражения для восприимчивости $\hat{\chi}$ сеточного фотонного кристалла получены в [1, 12]:

$$\chi_{\parallel(\perp)} = \frac{4\pi}{\Omega_2 k^2} \frac{A_{0\parallel(\perp)}}{1 + i\pi A_{0\parallel(\perp)} - 2CA_{0\parallel(\perp)}}, \quad (4)$$

символы $\parallel$ и $\perp$ обозначают волны с поляризацией параллельной и перпендикулярной оси нитей, образующих сеточный фотонный кристалл соответственно. $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число; R – радиус нити; $C = 0.5772$ – постоянная Эйлера; $\Omega_2 = d_y \cdot d_z$, где d_y и d_z – периоды фотонного кристалла вдоль осей y и z соответственно. Значения $A_{0\parallel}$ и $A_{0\perp}$ для нитей с конечной проводимостью получены в работе [1]:

$$A_{0\parallel} = \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R) J_0'(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R) J_0(kR)}{J_0(k_t R) H_0^{(1)'}(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R) H_0^{(1)}(kR)},$$

$$A_{0\perp} = \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R) J_0'(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R) J_0(kR)}{J_0(k_t R) H_0^{(1)'}(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R) H_0^{(1)}(kR)},$$

где ε_t – диэлектрическая проницаемость материала нити, $k_t = \sqrt{\varepsilon_t} k$, $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля нулевого порядка, J_0 и J_0' – функции Бесселя и их производные.

В рассматриваемом случае, в отличие от теории дифракции рентгеновских лучей, $\hat{\chi}_{\vec{\tau}}$ зависит от $\vec{r}$ благодаря тому, что выражение для $\hat{\chi}_{\vec{\tau}}$ зависит от объема элементарной решетки Ω_2 фотонного кристалла, который, в отличие от случая естественного кристалла, может существенно меняться в пространстве. Следует напомнить, что для идеального кристалла без искажений, волна,

распространяющаяся в кристалле, может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{\tau}=0}^{\infty} \vec{A}_{\vec{\tau}} e^{i(\vec{k}_{\vec{\tau}} \vec{r} - \omega t)}, \quad (5)$$

где $\vec{k}_{\vec{\tau}} = \vec{k} + \vec{\tau}$.

В рассматриваемом случае решение (2) можно записать в виде (сравните с [18]):

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left\{ \sum_{\vec{\tau}=0}^{\infty} \vec{A}_{\vec{\tau}} e^{i(\phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) - \omega t)} \right\}, \quad (6)$$

где $\phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} k(\vec{r}') d\vec{l}' + \Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r})$ и $k(\vec{r})$ могут быть найдены как решения дисперсионного уравнения вблизи точки с координатами $\vec{r}$, интегрирование ведется по квазиклассической траектории, которая описывает движение волнового пакета в фотонном кристалле с искажениями решетки.

Рассмотрим случай, когда все волны, участвующие в процессе дифракции, лежат в одной плоскости (двухволновая дифракция, многоволновая дифракция [17, 16]), т. е. все вектора обратной решетки $\vec{\tau}$ компланарны. Пусть вектор поляризации волны ортогонален плоскости дифракции.

Запишем (6) в виде $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(\vec{r}, t)$, где

$$E(\vec{r}, t) = \text{Re} \left\{ \vec{A}_1 e^{i(\phi_1(\vec{r}) - \omega t)} + \vec{A}_2 e^{i(\phi_2(\vec{r}) - \omega t)} + \dots \right\}, \quad (7)$$

$$\phi_1(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} \vec{k}_1(\vec{r}') d\vec{l}', \quad (8)$$

$$\phi_2(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} \vec{k}_1(\vec{r}') d\vec{l}' + \int_0^{\vec{r}} \vec{\tau}(\vec{r}') d\vec{l}'. \quad (9)$$

Умножение (2) на $\vec{e}$ дает

$$\Delta E(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int \hat{\epsilon}(\vec{r}, t - t') E(\vec{r}, t') dt' = \quad (10)$$

$$= 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right). \quad (11)$$

Подставляя (7) в (11), можно получить

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} e^{i(\phi_1(\vec{r}) - \omega t)} [2i \vec{k}_1(\vec{r}) \vec{\nabla} A_1 + i \vec{\nabla} \vec{k}_1(\vec{r}) A_1 - k_1^2(\vec{r}) A_1 + \\ & + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0(\omega, \vec{r}) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \epsilon_0(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{-\vec{\tau}}(\omega, \vec{r}) A_2 + \\ & + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \epsilon_{-\vec{\tau}}(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t}] + \text{сопряженные члены} = \\ & = 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} e^{i(\phi_2(\vec{r}) - \omega t)} [2i \vec{k}_2(\vec{r}) \vec{\nabla} A_2 + i \vec{\nabla} \vec{k}_2(\vec{r}) A_2 - k_2^2(\vec{r}) A_2 + \\ & + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, \vec{r}) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_r(\omega, \vec{r}) A_1 + \\ & + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_r(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t}] + \text{сопряженные члены} = 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right), \end{aligned}$$

где $\vec{k}_2(\vec{r}) = \vec{k}_1(\vec{r}) + \vec{\tau}$, $\varepsilon_0(\omega, \vec{r}) = 1 + \chi_0(\vec{r})$ и использовано обозначение $\chi_0(\vec{r}) = \chi_{\tau=0}(\vec{r})$, $\varepsilon_r(\omega, \vec{r}) = \chi_r(\vec{r})$. Заметим, что для численного анализа (12) при $\chi_0 \ll 0$ удобно использовать $\vec{k}_1(\vec{r})$ в виде $\vec{k}_1(\vec{r}) = \vec{n} \sqrt{k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \chi_0(\vec{r})}$.

Пусть период решетки фотонного кристалла изменяется только вдоль одной оси и это ось z .

Рассмотрим правую часть (2) и примем во внимание, что микроскопические токи и плотности представимы в виде суммы членов, содержащих дельта-функции, следовательно, правая часть может быть записана в виде

$$\begin{aligned} & e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right) = \\ & = -\frac{4\pi i \omega e}{c^2} \vec{e} \sum_\alpha \vec{v}_\alpha(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha(t)) e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} \theta(t - t_\alpha) \theta(T_\alpha - t), \end{aligned} \quad (13)$$

где t_α – время влета частицы α в резонатор, T_α – время вылета частицы из резонатора, θ – функции в (13) отражают тот факт, что в моменты времени, предшествующие t_α и следующие за T_α , частица α не дает вклада в процесс.

Предположим, что для проводки электронного пучка через зону генерации используется сильное поле. Тогда задача становится одномерной (компоненты v_x и v_y подавлены). Усредняя правую часть (13) по положениям частицы в пучке, точкам влета частицы в резонатор $r_{\perp 0\alpha}$ и времени влета частицы в резонатор t_α , мы можем получить

$$\begin{aligned} & e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right) = \\ & = -\frac{4\pi i \omega \rho \mathcal{G}_1 u(t) e}{c^2} \frac{1}{S} \int d^2 \vec{r}_\perp \frac{1}{T} \int_0^t e^{-i(\phi_1(\vec{r}, \vec{r}_\perp, t, t_0) + \vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - \omega t)} dt_0 = \\ & = -\frac{4\pi i \omega \rho \mathcal{G}_1 u(t) e}{c^2} \left\langle \left\langle e^{-i(\phi_1(\vec{r}, \vec{r}_\perp, t, t_0) + \vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - \omega t)} dt_0 \right\rangle \right\rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

где ρ – плотность электронного пучка, $u(t)$ – средняя скорость электронов, зависящая от времени из-за потерь энергии на излучение, $\mathcal{G}_1 = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\beta^2 k_1^2 c^2}}$,

$\beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2}$, $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ означает усреднение по поперечной координате точки влета частицы в резонатор $r_{\perp 0\alpha}$ и времени влета t_α .

Согласно [19], процедуру усреднения в (14) можно упростить, рассматривая случайные фазы (они входят в (14) в виде разностей), обусловленные случайными значениями поперечной координаты и времени влета. Поэтому двойное интегрирование по $d^2 \vec{r}_{\perp 0} dt_0$ можно заменить одиночным [19].

Система (12) в этом случае преобразуется к виду:

$$2ik_{1z}(z) \frac{\partial A_1}{\partial z} + i \frac{\partial k_{1z}(z)}{\partial z} A_1 - (k_\perp^2 + k_{1z}^2(z)) A_1 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, z) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} +$$

$$+ \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{-\tau}(\omega, z) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_{-\tau}(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} = i \frac{2\omega}{c^2} J_1(k_{1z}(z)),$$
(15)

$$2ik_{2z}(z) \frac{\partial A_2}{\partial z} + i \frac{\partial k_{2z}(z)}{\partial z} A_2 - (k_\perp^2 + k_{2z}^2(z)) A_2 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, z) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} +$$

$$+ \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\tau(\omega, z) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_\tau(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} = i \frac{2\omega}{c^2} J_2(k_{2z}(z)),$$

где токи J_1, J_2 определяются выражениями

$$J_m = 2\pi j \mathcal{G}_m \int_0^{2\pi} \frac{2\pi - p}{8\pi^2} (e^{-i\phi_m(t, z, p)} + e^{-i\phi_m(t, z, -p)}) dp,$$

$$\mathcal{G}_m = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\beta^2 k_m^2 c^2}}, \quad m=1, 2, \quad \beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2},$$
(16)

$j = en_0 v$ – плотность тока, $A_1 \equiv A_{\tau=0}$, $A_2 \equiv A_\tau$, $\vec{k}_1 = \vec{k}_{\tau=0}$, $\vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{\tau}$. Выражения для J_1 для k_1 независимых от z были получены в работе [19].

Если в процессе дифракции участвуют больше двух волн, то система уравнений (15) должна быть дополнена уравнениями для A_m , имеющими вид, подобный A_1 и A_2 .

Получим теперь уравнение для фазы. Из выражений (8, 9) следует, что

$$\frac{d^2 \phi_m}{dz^2} + \frac{1}{v} \frac{dv}{dz} \frac{d\phi_m}{dz} = \frac{dk_m}{dz} + \frac{k_m}{v^2} \frac{d^2 z}{dt^2}.$$
(17)

Введем новую функцию $C(z)$ таким образом, что

$$\frac{d\phi_m}{dz} = C_m(z) e^{-\int_0^z \frac{1}{v} \frac{dv}{dz} dz'} = \frac{v_0}{v(z)} C_m(z),$$
(18)

$$\phi_m(z) = \phi_m(0) + \int_0^z \frac{v_0}{v(z')} C_m(z') dz'.$$

Тогда

$$\frac{dC_m(z)}{dz} = \frac{v(z)}{v_0} \left(\frac{dk_m}{dz} + \frac{k_m}{v^2} \frac{d^2 z}{dt^2} \right).$$
(19)

В одномерном случае уравнение движения можно записать:

$$\frac{d^2 z_\alpha}{dt^2} = \frac{e\mathcal{G}}{m\gamma(z_\alpha, t, p)} \text{Re} E(z_\alpha, t), \quad (20)$$

следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{dC_m(z)}{dz} &= \frac{v(z)}{v_0} \frac{dk_m}{dz} + \\ &+ \frac{k_m}{v_0 v(z)} \frac{e\mathcal{G}_m}{m\gamma^3(z, t(z), p)} \text{Re}\{A_m(z, t(z))e^{i\phi_m(z, t(z), p)}\}, \\ \frac{d\phi_m(t, z, p)}{dz} \Big|_{z=0} &= k_{mz} - \frac{\omega}{v}, \quad \phi_m(t, z, p) \Big|_{z=0} = p, \end{aligned} \quad (21)$$

$$A_1|_{z=L} = E_1^0, \quad A_2|_{z=L} = E_2^0, \quad A_m|_{t=0} = 0, \quad m = 1, 2, \quad t > 0, \quad z \in [0, L], \quad p \in [-2\pi, 2\pi],$$

L – длина фотонного кристалла.

Эти уравнения должны быть дополнены уравнениями для $\gamma(z, p)$. Хорошо известно, что

$$mc^2 \frac{d\gamma}{dt} = e\vec{v}\vec{E}. \quad (22)$$

Следовательно,

$$\frac{d\gamma(z, t(z), p)}{dz} = \sum_l \frac{e\mathcal{G}_l}{mc^2} \text{Re}\left\{\sum_l A_l(z, t(z))e^{i\phi_l(z, t(z), p)}\right\}.$$

Уравнения (15, 18, 21, 22) позволяет описать процесс генерации в ЛСЭ с переменными параметрами фотонного кристалла. Анализ системы (21) может быть упрощен заменой $\gamma(z, t(z), p)$ его значением, усредненным по начальной фазе

$$\langle \gamma(z, t(z)) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(z, t(z), p) dp.$$

Следует заметить, что закон изменения параметров может быть как плавный, так и ступенчатый. Анализ такой системы показывает, что ее эффективность существенно превосходит эффективность системы с постоянными параметрами. Применение фотонных кристаллов позволяет создать разные конструкции ОЛСЭ (рис. 2).

Следует заметить, что в ЛСЭ (ЛБВ, ЛОВ) с резонатором (дифракционной решеткой, фотонным кристаллом), параметры которого меняются по длине (например, вдоль оси z), возникает электромагнитная волна с зависящим от z пространственным периодом (см. (6)). Это означает, что в резонаторе образуется динамический ондулятор с зависящим от z периодом. Хорошо известно, что такой ондулятор может существенно увеличить эффективность ондуляторного ЛСЭ. Предлагаемый динамический ондулятор с изменяющимся по длине периодом может использоваться для создания двухкаскадного ЛСЭ, который заметно эффективнее обычных систем. Более того, период динамического ондулятора

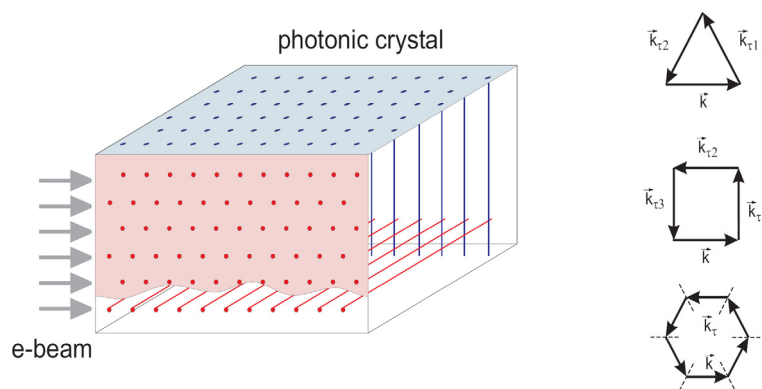


Рис. 2. Пример фотонного кристалла с расположением нитей, обеспечивающим многоволновую распределенную обратную связь. Нити расположены так, чтобы связать несколько (три, четыре, шесть, ...) волн, возникающих в результате дифракции, и в вертикальной и в горизонтальной плоскостях. Электронный пучок занимает весь объем кристалла

может быть заметно меньше, чем это возможно сделать в обычных ондуляторах. К тому же, благодаря зависимости фазовой скорости электро-магнитной волны от времени, в предлагаемой системе возможно сжатие импульса излучения.

3. Заключение

Рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами. Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

Литература

1. Болотовский Б. М., Воскресенский Г. В. // УФН. 1966. Т. 88. С. 209.
2. Kompfner R. // Wireless World. 1946. Vol. 52. P. 369.
3. Pierce R. // Proc. IRE. 1947. Vol. 35. P. 111.
4. Smith S. J., Purcell E. M. // Phys. Rev. 1953. Vol. 92. P. 1069.
5. Salisbury W. W. // US Patent 1953. 2,634,372; J. Opt. Soc. Am. 1970. Vol. 60. P. 1279.
6. Doucas G., Mulvey J. H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 1761; Walsh J. E. // US Patent 1996. 5,790,585.
7. Baryshevsky V. G. // NIM A. 2000. Vol. 445. P. 281; LANL e-print archive physics/9806039.
8. Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al. // NIM A. 2002. Vol. 483. P. 21.
9. Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al. // NIM A. 2003. Vol. 507. P. 137.

10. *Granatstein V. L., Parker R. K., Armstrong C. M.* // Proc. IEEE. 1999. Vol. 87, №5.
11. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G.* et al. // NIM Vol. 393A. 1997. 71.
12. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // LANL e-print archive: physics/0409107
13. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G.* et al. // LANL e-print archive: physics/0409125.
14. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM B. 2006. Vol. 252. P. 92.
15. *Baryshevsky V. G., Belous N. A.* et al. // LANL e-print arXiv: physics/0605122.
16. *James R. W.* The Optical Principles of Diffraction of X-Rays. 1982.
17. *Chang S.-L.* Multiple diffraction of x-rays in crystals. 1984.
18. *Takagi S.* // Acta Crystall. 1962. Vol. 15. P. 1311.
19. *Batrakov K. G., Sytova S. N.* // Comp. Math. Math. Phys. 2005. Vol. 45, № 4. P. 666.

ELECTRODYNAMICAL PROPERTIES OF A VOLUME FREE ELECTRON LASER WITH A "GRID" RESONATOR WITH VARIABLE PARAMETERS

V. G. Baryshevsky, A. A. Gurinovich

The electrodynamic properties and lasing in Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator ("grid" photonic crystal) with changing in space parameters are considered. The equations describing lasing of VFEL with such a resonator are obtained. It is shown that use of diffraction gratings (photonic crystal) with variable period increases radiation intensity and provide to create the dynamical wiggler with variable period. This makes possible to develop a double-cascaded FEL with variable parameters, which efficiency can be significantly higher then that of conventional system.

ПЕРВЫЕ ШАГИ В ИССЛЕДОВАНИИ ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ ОБЪЕМНЫХ ЛАЗЕРОВ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

С. Н. Сытова

Использование открытой учеными НИИ ЯП закономерности возрастания инкремента неустойчивости пучка частиц, пролетающего через пространственно-периодическую мишень, от числа волн, возбуждаемых в решетке, в условиях дифракции Брэгга легло в основу создания принципиально новых генераторов электромагнитного излучения – объемных лазеров на свободных электронах (ОЛСЭ). Принципы и теоретические основы функционирования ОЛСЭ были заложены в работах [1], [2] как основа создания рентгеновского лазера и продолжены в [3–8]. Первое экспериментальное наблюдение генерации ОЛСЭ в миллиметровом диапазоне было проведено в НИИ ЯП БГУ в 2001 г. [9–10]. Подтверждено, что с использованием объемной распределенной обратной связи (ОРОС) могут работать не только ОЛСЭ, но и лампы обратной волны (ЛОВ), лампы бегущей волны (ЛБВ) и др. типы электромагнитных усилителей и генераторов. В 2004 г. в НИИ ЯП создана ЛОВ и ОЛСЭ с сеточным резонатором, работающие в сантиметровом диапазоне длин волн [11]. Такого рода генераторы в различных диапазонах необходимы для создания нового поколения ускорителей элементарных частиц, передачи электромагнитной энергии на большие расстояния, нагрева термоядерной плазмы, высокостабильных передатчиков для систем связи в СВЧ-диапазоне и т. д.

Отличительной особенностью ОЛСЭ является использование в качестве объемных резонаторов одно-, двух- и трехмерных дифракционных решеток, обеспечивающих объемную распределенную обратную связь и, как следствие, возможность плавной перестройки частоты в широком диапазоне частот, получения высокой мощности излучения и генерации излучения одновременно на нескольких частотах. Двух- или трехмерные дифракционные решетки позволяют распределить взаимодействие по большому объему и снизить ограничения на мощность в резонаторе, что дает возможность получать на многие порядки большие мощности излучения благодаря отсутствию электрических пробоев по сравнению с другими системами, например, лазерами на свободных электронах (ЛСЭ).

Линейный режим работы ОЛСЭ изучен достаточно хорошо [3–7], но он быстро сменяется нелинейной стадией, на которой происходит основная генерация излучения. Математические модели, описывающие эту стадию работы, представляют собой системы многомерных нелинейных интегро-дифференциальных уравнений. Очевидно, что нелинейный режим работы может быть исследован только с использованием численных методов, поскольку аналитически получить решения таких систем уравнений не представляется возможным.

Проведенное математическое моделирование нелинейной стадии работ ОЛСЭ [12–19] подтвердило все основные физические закономерности и прин-

ципы работы ОЛСЭ, в частности, радикальное изменение пороговых условий генерации ОЛСЭ, предсказанные в работах [1, 2]. В ходе численных экспериментов были исследованы:

- пороги генерации по плотности тока пучка, длине мишени, поглощению мишени, факторам асимметрии дифракции для двух- и трехволновых ОЛСЭ;
- ширина режима усиления по плотности тока пучка для двух- и трехволновых ОЛСЭ включая геометрию Лауэ;
- режим SASE (self-amplified stimulated emission) в геометрии Лауэ и Лауэ – Лауэ;
- электродинамическая картина в геометрии Брэгга с внешними зеркалами для различных коэффициентов отражения;
- режим генерации в геометрии Лауэ с внешними зеркалами;
- различные режимы в области вырождения корней для трехволновых геометрий Брэгг – Брэгг и Брэгг – Лауэ в зависимости от параметра отстройки от точного выполнения черенковского условия, системных параметров и факторов асимметрии дифракции.

Показано, что существует оптимальный набор параметров для эффективной генерации излучения в каждом из вышеперечисленных случаев.

При моделировании ОЛСЭ мы столкнулись с хаотическим характером нелинейных режимов работы ОЛСЭ [13–19]. Их исследование очень важно, поскольку изменение управляющих параметров ведет через бифуркации к изменению режимов работы ОЛСЭ. В работах [14–16] продемонстрирован переход с ростом тока от стадии стационарного нелинейного насыщения к колебательной динамике с последовательным удвоением периода и далее к хаотическому поведению. В работах [17–19] приведены карты динамических режимов осцилляций ОЛСЭ на параметрических плоскостях: плотность тока – фактор асимметрии, плотность тока – отклонение от условия синхронизма, плотность тока – длина резонатора.

Данная работа посвящена дальнейшему исследованию хаотической динамики ОЛСЭ. Проведено сравнение работы ОЛСЭ в режиме усиления и режиме генерации при прочих равных условиях, а также чувствительность решений к малым возмущениям начальных данных, что является хорошей верификацией используемых численных алгоритмов и программных средств. Получены карты динамических режимов перехода к хаосу в ОЛСЭ в зависимости от изменения плотности тока и диэлектрической проницаемости резонатора, а также одного из системных параметров.

1. Физическая и математическая модели ОЛСЭ

Резонатор установки ОЛСЭ-10 [9] был сформирован двумя дифракционными решетками с различными периодами и двумя гладкими боковыми стенками. Взаимодействие первой дифракционной решетки (возбуждающей) с электронным пучком генерирует излучение Смит – Парсела. Вторая (резонансная) решетка обеспечивает распределенную обратную связь между полем и электронным пучком посредством динамической дифракции Брэгга. Конструкция

резонатора позволяет изменять его параметры в течение эксперимента (вращать и изменять расстояние между дифракционными решетками и электронным пучком). Это обеспечивает возможность настройки условий двухволновой дифракции.

Электродинамические свойства объемного резонатора [11], который сформирован периодической структурой, построенной из металлических нитей в прямоугольном волноводе, зависят от условий дифракции. В этом случае возникает эффект аномальной передачи электромагнитных волн подобно эффекту Бормана, хорошо известному из динамической теории рентгеновской дифракции [2]. Вторая (резонансная) решетка обеспечивает распределенную обратную связь между излучением и электронным пучком посредством динамической брэгговской дифракции.

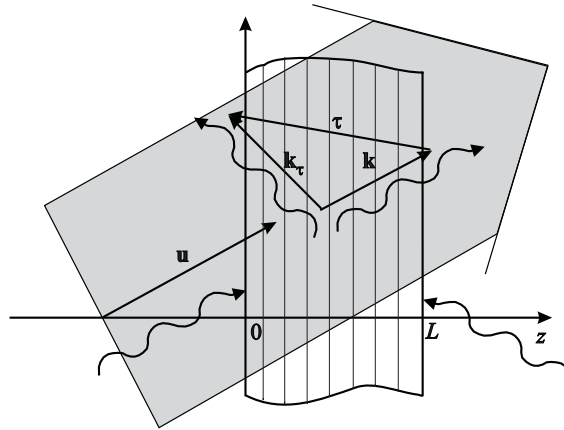


Рис. 1. Объемная схема ОЛСЭ в геометрии Брэгга

Обе эти схемы ОЛСЭ могут быть сведены к следующей простой модели акуратным определением диэлектрической проницаемости среды. На рис. 1 изображена объемная схема двухволнового ОЛСЭ в геометрии Брэгга. Электронный пучок со скоростью u «падает» под некоторым углом на полубесконечную трехмерную пространственно-периодическую мишень толщиной L . Электроны пучка в мишени начинают испускать спонтанное излучение, которое при одновременном выполнении условий дифракции [20]

$$2\mathbf{k}\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^2 \approx 0$$

и условия синхронизма – условия Вавилова – Черенкова:

$$\omega - \mathbf{k}\mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

преобразуется в коллективное квазичеренковское излучение с частотой ω и волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_t = \mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}$, где $\boldsymbol{\tau}$ – вектор обратной решетки мишени. Таким образом, реализуется т. н. режим генератора (осциллятора) в ОЛСЭ. При наличии падающих на мишень внешних электромагнитных волн с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и (или) $\mathbf{k}_t$ может реализоваться режим усиления.

В геометрии Брэгга могут быть реализованы несколько различных режимов работы: 1) величина тока меньше критической и коллективное излучение отсутствует; 2) при достижении критической величины тока становится возможен

режим усиления электронным пучком внешних падающих электромагнитных волн; 3) при дальнейшем увеличении тока и превышении им порогового значения j_{th} реализуется режим генерации.

Уравнения, описывающие нелинейную стадию работы ОЛСЭ, получаются из уравнений Максвелла в приближении медленно меняющихся амплитуд:

$$\Delta \mathbf{E} - \nabla(\nabla \mathbf{E}) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{\partial \mathbf{j}_b}{\partial t},$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, $\mathbf{j}_b$ – плотность тока электронного пучка.

В случае двухволновой дифракции решение ищется в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{e} (E e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + E_\tau e^{i(\mathbf{k}_\tau \mathbf{r} - \omega t)}),$$

$$\mathbf{j}_b = \mathbf{e} j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)},$$

где i – мнимая единица, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации [20].

Пучок моделируется усреднением по фазам влета электронов в область взаимодействия [21]. Этот метод хорошо известен и широко применяется для расчета ЛБВ, ЛОВ, ЛСЭ и других электронных приборов. Как было показано в наших исследованиях, этот метод также хорошо работает при моделировании динамики пучка в ОЛСЭ [14]. Более того, поскольку уравнение для пучка имеет более сложный вид, чем обычно используемый в литературе [25], [28], это позволило учесть тонкие эффекты, связанные со взаимодействием пучка и электромагнитного поля в условиях ОРОС. Итак, система, моделирующая двухволновой ОЛСЭ, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \gamma c \frac{\partial E}{\partial z} + 0.5i\omega l E - 0.5i\omega \chi_\tau E_\tau = F(j), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_\tau}{\partial t} + \gamma_1 c \frac{\partial E_\tau}{\partial z} - 0.5i\omega \chi_{-\tau} E + 0.5i\omega l_1 E_\tau = 0,$$

$$F(j) = 2\pi j \Phi \int_0^{2\pi} \frac{2\pi - p}{8\pi^2} (\exp(-i\Theta(t, z, p)) + \exp(-i\Theta(t, z, -p))) dp, \quad (3)$$

$$\frac{d^2 \Theta(t, z, p)}{dz^2} = \frac{e\Phi}{m\gamma^3 \omega^2} \left(k - \frac{d\Theta(t, z, p)}{dz} \right)^3 \text{Re}(E(t - z/u, z) \exp(i\Theta(t, z, p))), \quad (4)$$

$$\Theta(t, 0, p) = p, \quad \frac{d\Theta(t, 0, p)}{dz} = k_z - \omega/u, \quad (5)$$

$$E|_{z=0} = E_0, \quad E_\tau|_{z=L} = E_{\tau 0}.$$

где $\gamma_{0,1}$ – направляющие косинусы, $\Phi = \sqrt{l_0 + \chi_0 - 1/(u/c\gamma)^2}$, $\beta_1 = \gamma_0 / \gamma_1$ – фактор асимметрии, $l = l_0 + \delta$, δ – отклонение от точного выполнения условия Черенкова, γ – Лоренц-фактор пучка, $\epsilon_0 = 1 + \chi_0$ – диэлектрическая проницаемость

резонатора, $\chi_0, \chi_{\pm\tau}$ – коэффициенты разложения диэлектрической восприимчивости резонатора в ряд по векторам обратной решетки. Функция $\Theta(t, z, p)$ описывает фазу электронов относительно электромагнитной волны.

Системные параметры l_0 и l_1 имеют вид

$$l_0 = \frac{\mathbf{k}^2 c^2 - \omega^2 \varepsilon_0}{\omega^2}, \quad l_1 = \frac{\mathbf{k}_\tau^2 c^2 - \omega^2 \varepsilon_0}{\omega^2}.$$

Дисперсионное уравнение, соответствующее двухволновой системе (2), записывается следующим образом:

$$\begin{vmatrix} l_0 & -\chi_\tau \\ -\chi_{-\tau} & l_1 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{или} \quad l_0 l_1 - \chi_\tau \chi_{-\tau} = 0.$$

При задании системного параметра l_0 параметр l_1 определяется из данного дисперсионного уравнения.

Необходимые численные методы для решения системы (2) – (5) были разработаны в [12–14]. Создан комплекс программ VOLC для моделирования ОЛСЭ [16] – «инструмент» для моделирования работы экспериментальной физической установки ОЛСЭ, создаваемой в НИИ ЯП.

2. Хаос в ОЛСЭ

Хаотическая динамика – естественная тенденция широкого класса систем к переходу в состояния, в которых обнаруживается как детерминированное поведение, так и непредсказуемость. Хорошо известны примеры хаотической динамики, например, турбулентность в жидкости, газе и плазме, хаос в биологических и химических системах и т. д. [22]. Известно, что в одно- и двумерных системах существуют только устойчивые состояния равновесия и периодические движения. Только в гладкой дифференцируемой динамической системе с числом степеней свободы большим 2 возможна хаотизация движений. Система, описывающая ОЛСЭ и рассматриваемая в настоящей работе, именно такова.

Бифуркация – качественное изменение поведения динамической системы, ее перестройка, происходящая при переходе управляющего параметра μ через некоторое критическое бифуркационное значение μ_0 – точку бифуркации. В этой точке у системы появляется «выбор» из нескольких возможных моделей поведения, в котором присутствует элемент случайности. Знание основных точек бифуркаций позволяет существенно облегчить исследование реальных систем, в частности предсказать характер новых движений, возникающих в момент перехода системы в качественно другое состояние, оценить их устойчивость и область существования.

Изучение хаотического поведения ЛСЭ занимает немало места в современных исследованиях [23–27], в частности, известны параметризация нелинейных и хаотических колебаний ЛСЭ [23], [27]. В работе [27] было показано, что для ЛСЭ существуют следующие возможные сценарии перехода к хаосу: удвоение периода, квазипериодичность и перемежаемость. Квазипериодичность связана с бифуркациями Хопфа, которые вводят новую частоту в систему. Перемежаемость связана с бифуркациями седловых точек, т. е. столкновением устойчивой

и неустойчивой точек, которые затем исчезают. Здесь после хаоса может появиться вновь регулярное движение.

Аналитическое исследование хаоса в системе (2) – (5) представляется невозможным из-за ее сильной нелинейности. Кроме того, большое количество внешних управляющих параметров, таких как, например, ток пучка, длина системы, направляющие косинусы ОРОС, поглощение мишени, факторы асимметрии дифракции, параметры отстройки, системные параметры l_i и т. д. многократно увеличивает объем работы. Прохождение электронного пучка через пространственно-периодическую мишень в ОЛСЭ ведет к возникновению разнообразных особенностей динамики генерации, которые происходят из-за нелокальной природы взаимодействия между электронным пучком и электромагнитным полем в условиях ОРОС. Так как ОЛСЭ – нелинейная динамическая система, она характеризуется различными режимами работы, а именно – устойчивое состояние, периодичность, квазипериодичность и хаос.

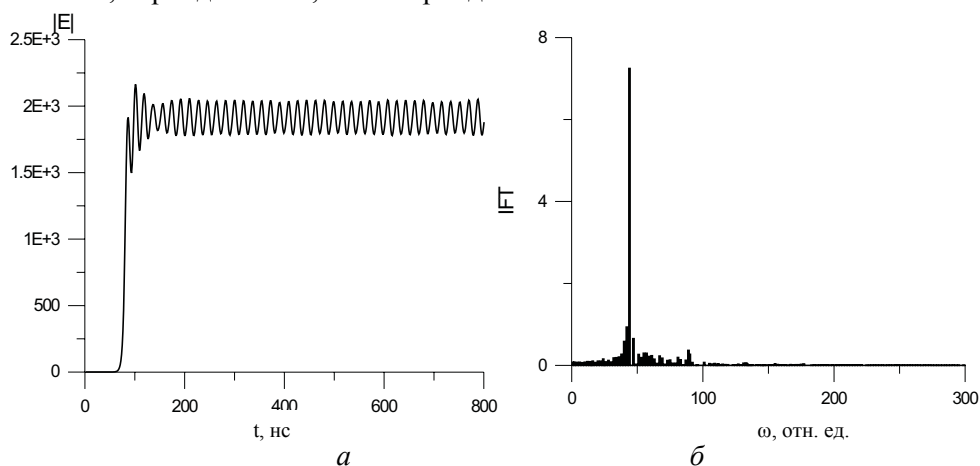


Рис. 2. Периодический режим (а) и его энергетический спектр (б)

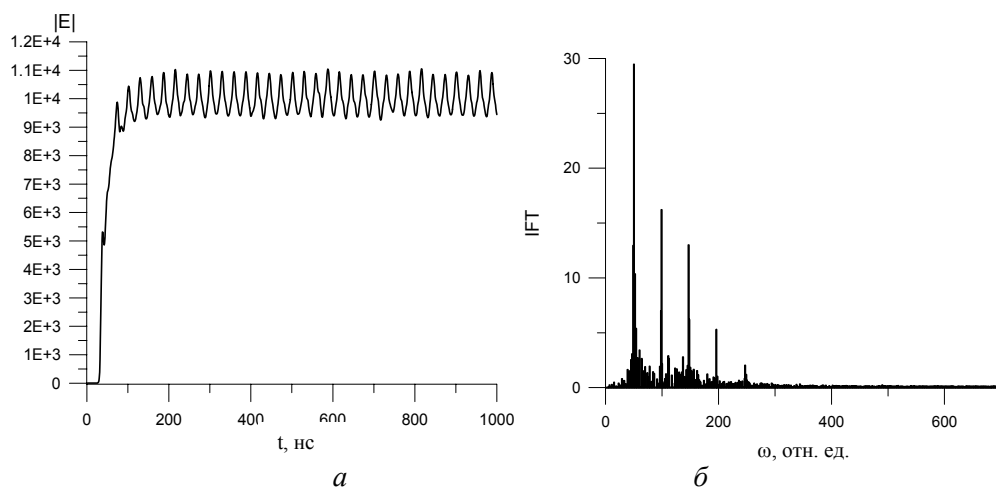


Рис. 3. Периодический режим с одной частотой и ее линейной комбинацией (а), его энергетический спектр (б)

3. Исследование хаоса в режиме генерации

Сначала ограничимся исследованием хаотического поведения в двумерной системе для геометрии Брэгга в режиме генерации. Характерные периодические режимы изображены на рис. 2–8 для следующего набора исходных параметров: $\lambda = 3$ см, $L = 20$ см, $j = 400 \div 3000$ А/см², $\beta = (-20) \div (-1)$, $\delta kL = -20 \div 20$, $l_0 = 1.0$, $\chi_0 = -0.1$, $\chi_\tau = 0.1$.

На рисунках 2 и 3 типичные периодические режимы с одной частотой и ее линейной комбинацией показаны вместе с их энергетическими спектрами (IFT). В некоторых областях параметрической карты перехода к хаосу период удваивается и учетверяется.

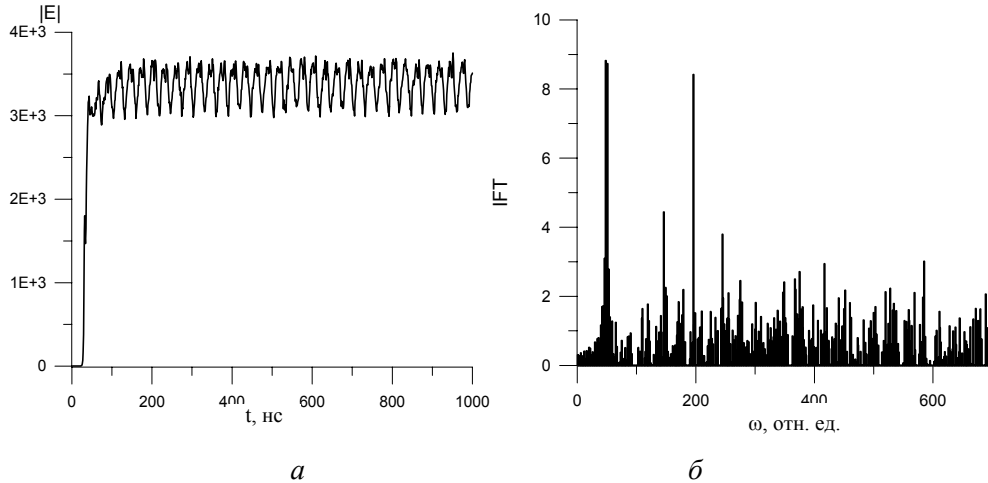


Рис. 4. «Слабый» хаос (а) и его энергетический спектр (б)

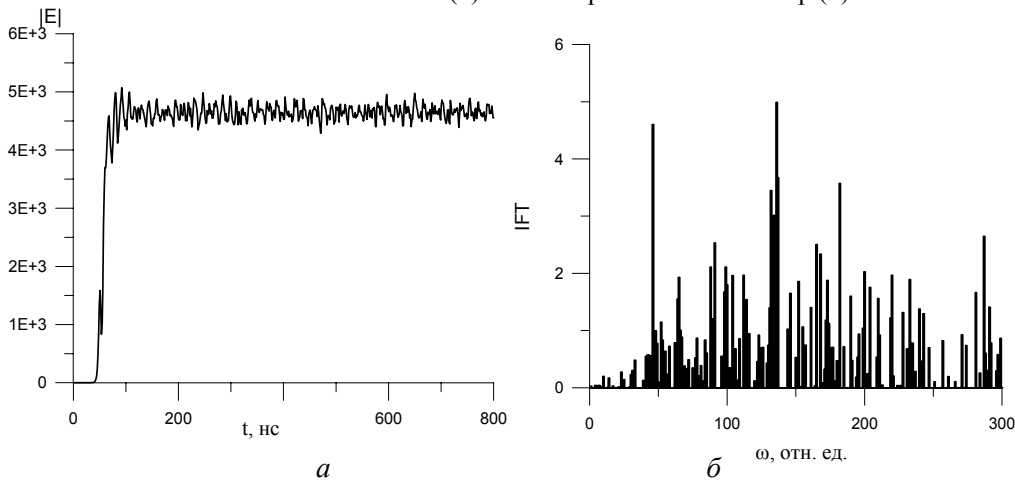


Рис. 5. Хаотические автоколебания (а) и соответствующий энергетический спектр (б)

Другой типичный режим – квазипериодические колебания с несоизмеримыми частотами, возникающими при бифуркациях Хопфа будет приведен ниже на рис. 8 и 10. В некоторых областях этот режим преобразуется в так называемый «слабый» хаос [26], где зависимость амплитуды от времени выглядит как приближительное повторение однотипных пиков близких размеров за приблизительно равные промежутки времени. Этот процесс изображен на рис. 4. «Слабый» хаос и квазипериодичность ведут к стохастическим автоколебаниям или «развитому» хаосу, представленному на рис. 5.

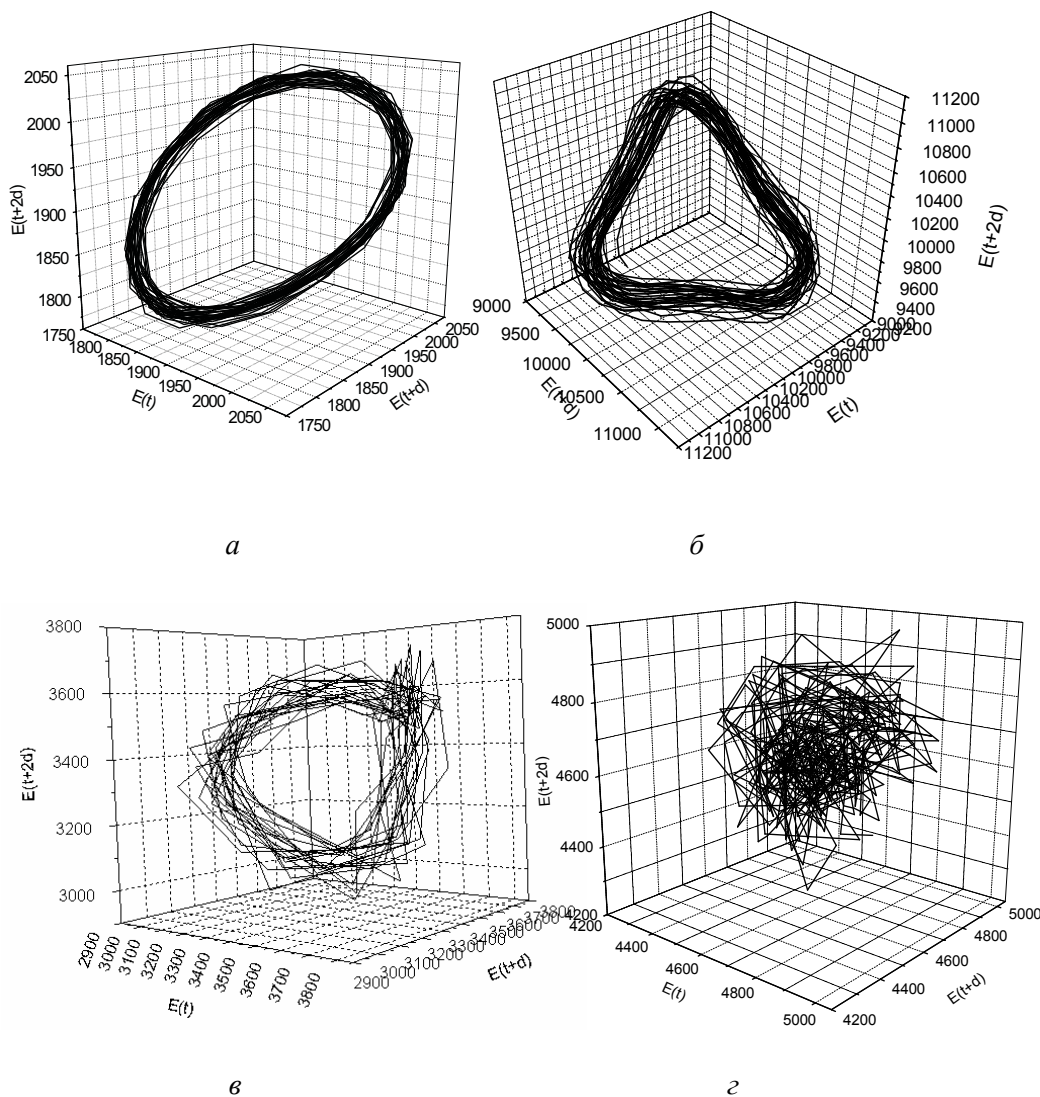


Рис. 6. Аттракторы для периодического (а), периодического с линейной комбинацией частот (б), «слабого» хаотического режима (в) и хаотических автоколебаний (г)

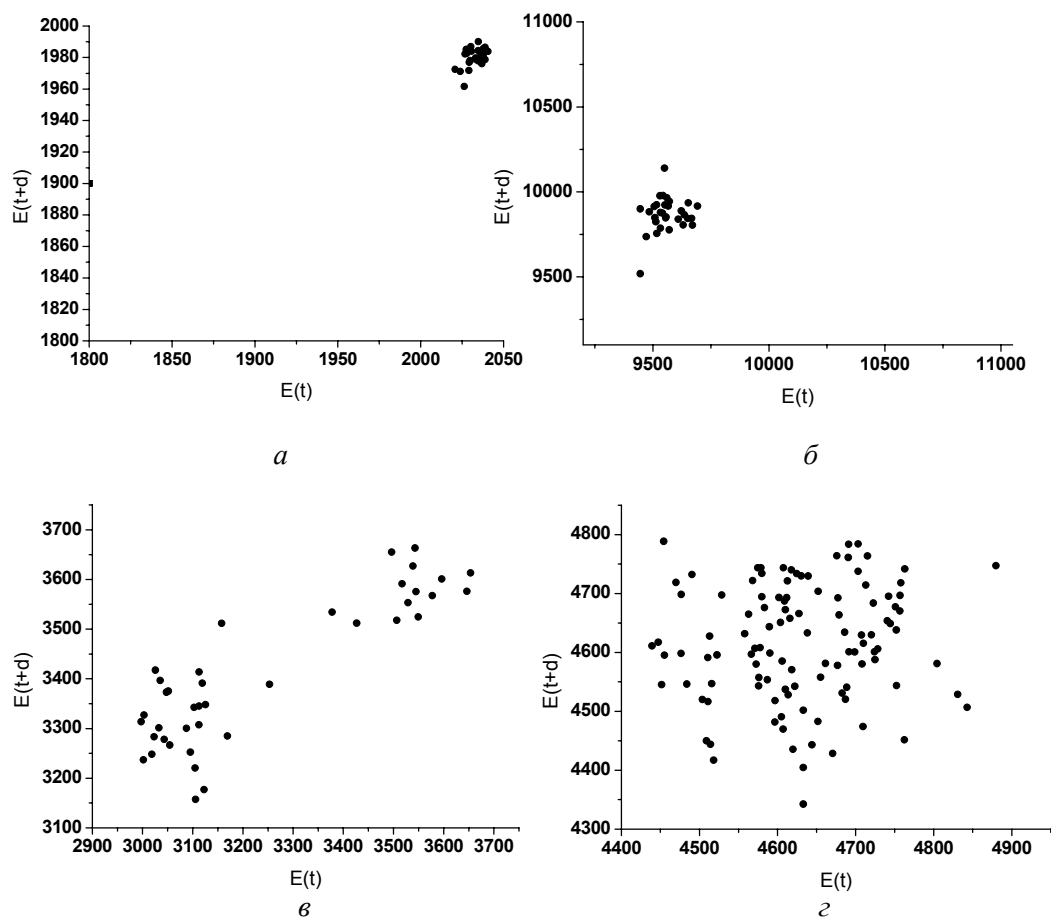


Рис. 7. Сечения Пуанкаре для периодического (а), периодического с линейной комбинацией частот (б), «слабого» хаотического режима (в) и хаотических автоколебаний (г), соответствующие рис. 6

Аттракторы – множество точек в фазовом пространстве динамической системы, к которым стремятся траектории системы – являются очень хорошей иллюстрацией периодических и хаотических режимов работы динамических систем. Соответствующие рис. 2–5 аттракторы изображены на рис. 6. Период d для каждого рисунка свой и не превышает 20 нс.

Аттракторы периодических решений расположены приблизительно в одной плоскости в фазовом пространстве, в то время как аттрактор слабого хаоса изогнут как восьмерка. Хаотические автоколебания представлены спутанным клубком линий, в котором не удастся выявить какую-либо упорядоченную структуру. Это хорошо можно продемонстрировать на так называемых сечениях или отображениях Пуанкаре [22], которые изображены на рис. 7. Здесь во всех случаях для удобства площадка S секущей поверхности выбиралась параллельной плоскости (X, Y) (или точнее $(E(t), (E(t+d)))$), поскольку интересующие нас фазовые траектории пересекают ее многократно.

Алгоритм построения сечения Пуанкаре был основан на последовательном просмотре наборов данных, используемых для построения аттракторов, и восстановлении координат точек (x, y, z_0) при пересечении фазовой траектории площадки S с координатой $z = z_0$.

Как и следовало ожидать, сечения Пуанкаре для периодических и хаотических режимов ОЛСЭ имеют соответствующий вид, а именно: для одноперiodических режимов сечения представляют собой односвязные компактные множества, а хаотические – неравномерно распределены в большом объеме. На рис. 11, *в* квазипериодический двухчастотный режим представлен двумя множествами, описывающими обе частоты.

Теперь рассмотрим переход к хаосу через перемежаемость. На рис. 8 показана следующая цепочка бифуркаций при изменении параметра плотности тока $j = 1750 \div 2350$ А/см²:

квазипериодичность ↔ хаос ↔ перемежаемость ↔ периодичность.

Для токов j , меньших 1750 А/см² (как это будет продемонстрировано ниже), наблюдаются области с периодичностью, квазипериодичностью и слабым хаосом. Аттракторы, соответствующие графику 5 на рис. 8, изображены на рис. 9. Энергетический спектр, представляющий квазипериодические колебания с двумя несоизмеримыми частотами, соответствующий рис. 8, *а*, кривая 1, изображен на рис. 10. Здесь же представлен аттрактор, который имеет форму двух изогнутых в пространстве четырехугольников, смещенных друг относительно друга, каждый из которых описывает свою частоту.

При численном решении систем уравнений всегда возникает вопрос, является ли наблюдаемый «хаос» хаосом на самом деле либо результатом некорректного учета ошибок округления или конечного порядка аппроксимации дифференциальных уравнений разностными. Одним из возможных ответов на данный вопрос является исследование чувствительности решений к малым возмущениям начальных данных. Если неустойчивость решений будет наблюдаться именно для хаотических режимов, а для периодических и квазипериодических решение будет устойчивым, то это явится хорошей верификацией используемых численных алгоритмов и программных средств. Аналитически проверить устойчивость и сходимость предложенных разностных методов не представляется возможным в силу сильной нелинейности полученной разностной и исходной дифференциальной системы.

В работе [26] показано, что неустойчивость фазовых траекторий динамического хаоса, проявляющаяся в высокой чувствительности движения к малым возмущениям начальных условий, присуща динамике ЛОВ. Исследуем свойства чувствительности полученных решений к возмущениям стартовой плотности тока пучка j для различных режимов работы ОЛСЭ-генератора. На рис. 11, *а* для слабого хаоса наблюдается отстройка от решения при изменении значения плотности тока на $\delta j = 10^{-8}$ А/см², хотя общая форма решения сохраняется, в то время как для периодического режима заметные отличия в решении наблюдаются при $\delta j = 10$ А/см², которое уже, очевидно, не является малым возмущением. Это же справедливо и для квазипериодического режима (рис. 8, кривая 2), изображенного на рис. 12 в логарифмической шкале.

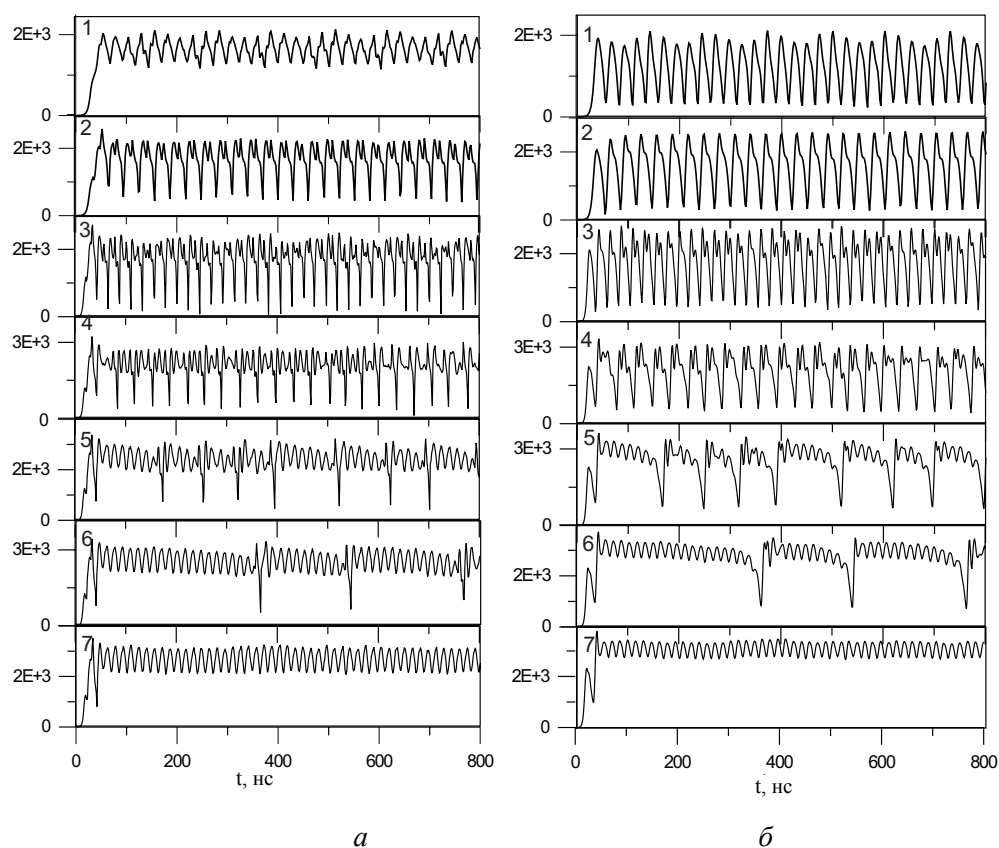


Рис. 8. Переход к хаосу через квазипериодичность и перемежаемость для проходящей (*a*) и дифрагированной (*б*) волн при плотности тока j , равной 1) 1750 A/cm^2 , 2) 1950 A/cm^2 , 3) 2150 A/cm^2 , 4) 2220 A/cm^2 , 5) 2300 A/cm^2 , 6) 2340 A/cm^2 , 7) 2350 A/cm^2

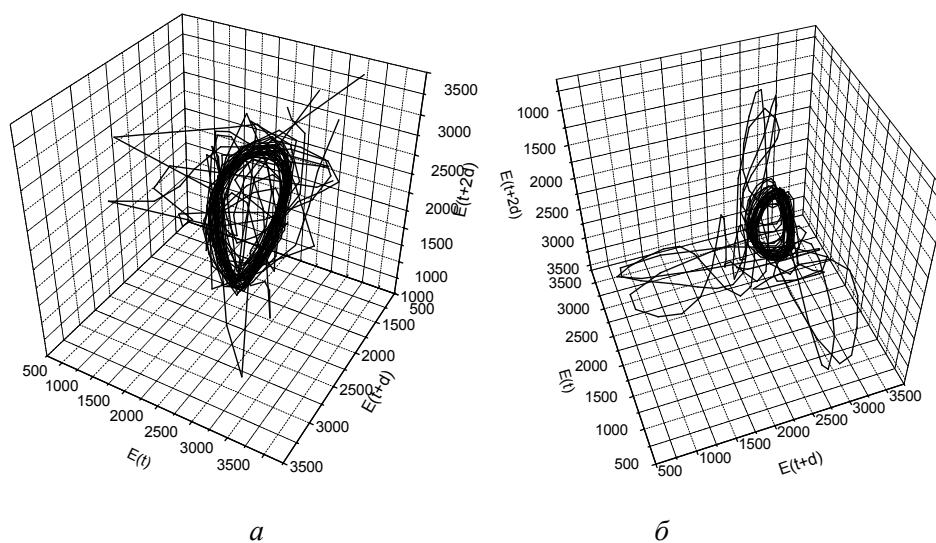


Рис. 9. Аттракторы для проходящей (*a*) и дифрагированной (*б*) волн, $j = 2340 \text{ A/cm}^2$

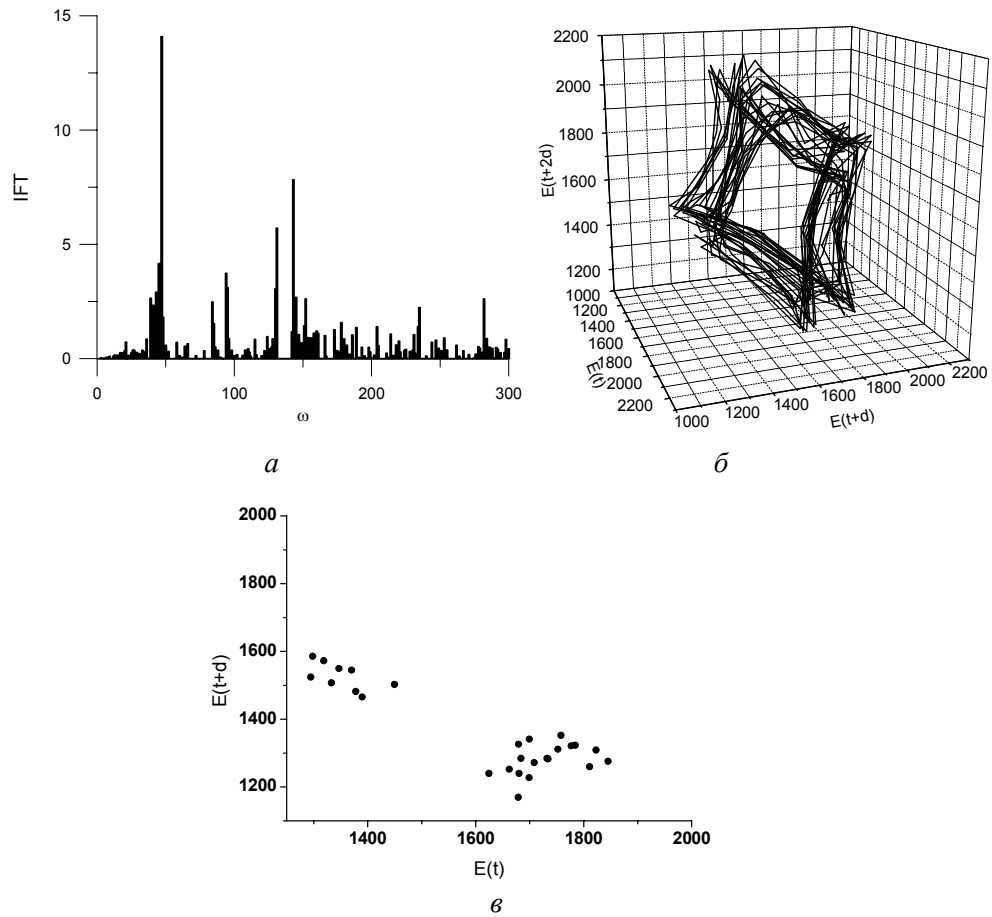


Рис. 10. Энергетический спектр (а), аттрактор (б) и сечение Пуанкаре (в) для квазипериодического режима при $j = 1750 \text{ A/см}^2$

Еще одним важным параметром, характеризующим сложную внутреннюю динамику системы, являются старшие ляпуновские характеристические показатели [22]. Пусть для двух близких начальных условий

$$f(t_1) \approx f(t_2)$$

задано малое возмущение

$$\Delta^0 = f(t_1) - f(t_2).$$

Если обозначить

$$\Delta_t \approx f(t_1 + t) - f(t_2 + t),$$

то можно записать, что

$$\Delta_t \approx \Delta^0 \exp(\lambda t).$$

Здесь показатель Ляпунова λ характеризует среднюю скорость экспоненциального разбегания соседних точек, что ведет к хаосу. Кроме этого, он определяет среднюю потерю информации о состоянии динамической системы с течением

времени. В N -мерной динамической системе существует ровно N ляпуновских показателей. Старший показатель предоставляет наибольшую информацию о системе, поскольку если он положителен, то система является хаотической. В частности, для размерности $N = 3$ набор показателей Ляпунова соответствует следующим вариантам поведения системы: $<- , - , ->$ – притягивающая неподвижная точка, $<0 , - , ->$ – предельный цикл, $<0 , 0 , ->$ – двумерный тор, $<+ , 0 , ->$ – странный аттрактор (слабый хаос). В случае большей размерности может существовать вариант $<+ , + , 0 , \dots>$, соответствующий гиперхаосу, когда положительных показателей больше одного.

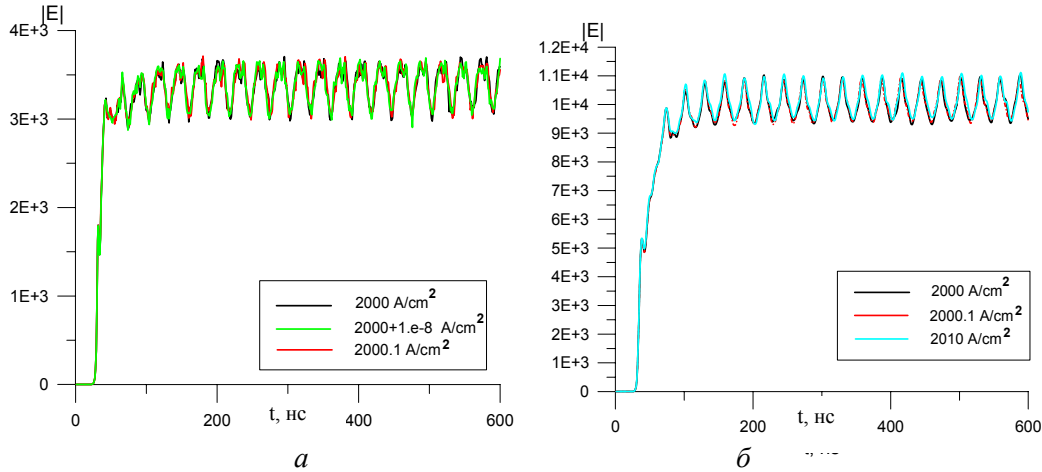


Рис. 11. Чувствительность (а) слабого хаотического решения (рис. 4) и (б) периодического решения (рис. 3) генератора к возмущению плотности тока пучка

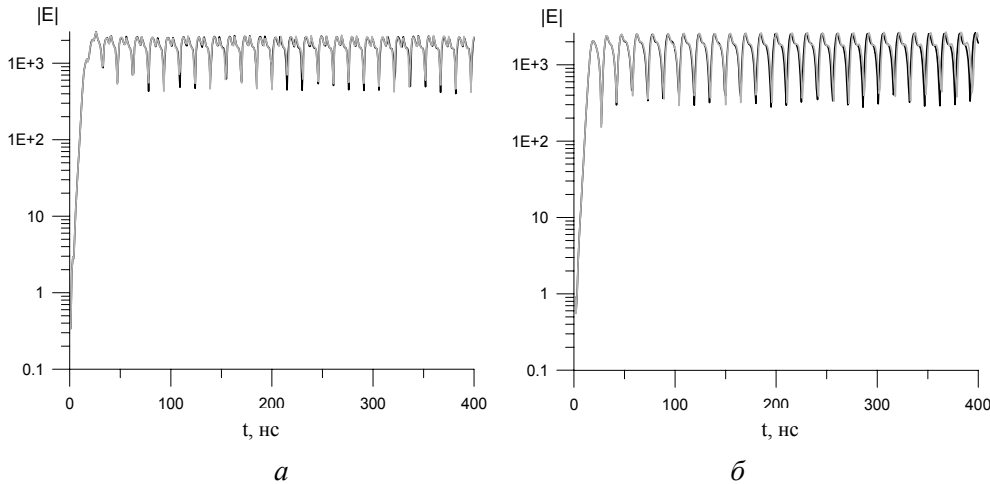


Рис. 12. Чувствительность квазипериодического решения (рис. 8, графики 2) для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн к возмущению плотности тока пучка, черная линия $-j = 1950 \text{ A/cm}^2$, серая линия $-j = 1960 \text{ A/cm}^2$

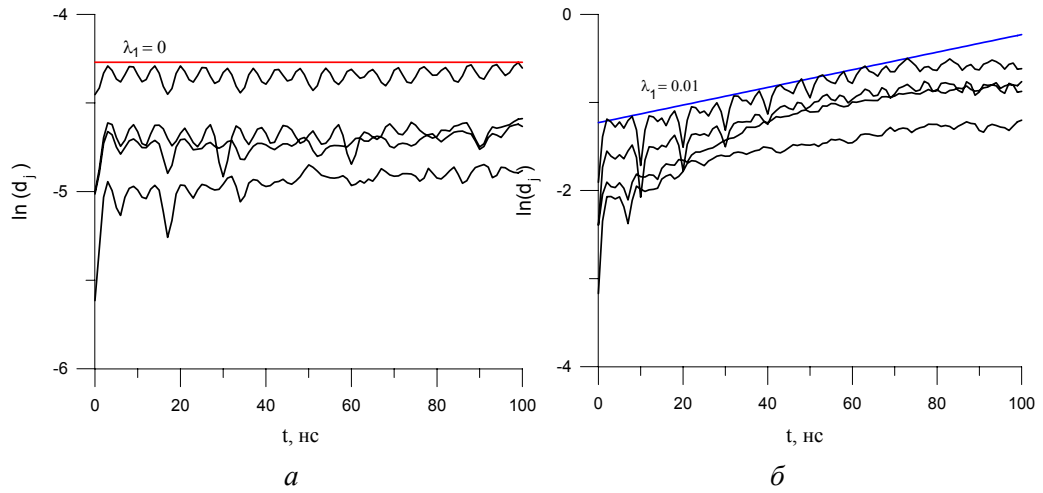


Рис. 13. Старшие показатели Ляпунова для (а) периодического режима (рис. 2) и (б) хаотических автоколебаний (рис. 8, а, кривая 4, $j = 2340 \text{ А/см}^2$)

Преимуществом алгоритма Розенштейна [28], которым мы пользовались, и кода L1D2 [29] является использование только одного набора данных относительно небольшой размерности (вплоть до нескольких сот временных точек). В соответствии с этим алгоритмом рассматривается множество значений функции в зависимости от времени вида:

$$\{f_1, f_2, \dots, f_N\}.$$

Из этого множества значений строятся векторы состояний:

$$F_i = [f_i, f_{i+J}, \dots, f_{i+(m-1)J}],$$

где J есть задержка, а m – размерность вложения.

Из векторов состояний F_i формируется реконструируемая траектория

$$F = [F_1, F_2, \dots, F_M]^T.$$

Если рассмотреть расхожимость в i -й момент времени:

$$d_j(i) = \min_{F_j} \|F_i - F_j\|,$$

где $\|\cdot\|$ есть Евклидова норма, то

$$\ln d_j(i) \approx \ln \Delta_j^0 + \lambda_1(i\Delta t),$$

где Δ_j^0 – начальное малое возмущение, Δt – шаг по времени.

На рисунке 13 приводится аппроксимация старших показателей Ляпунова для периодического режима (рис. 2, а) с $\lambda_1 = 0$ (как и должно быть в случае предельного цикла) и хаотических автоколебаний (рис. 8, а, кривая 1) с $\lambda_1 = 0.01$. Каждая из осциллирующих кривых соответствует проведенным по программе

L1D2 вычислениям (данные были отнормированы) для различных значений задержек J и размерностей вложения m . Как и следовало ожидать, в первом случае старший показатель Ляпунова равен нулю, что полностью соответствует решению с предельным циклом, а во втором – показатель положителен. Здесь можно было бы привести аналогичное рис. 11 и рис. 12 исследование чувствительности решения к малым возмущениям начальных данных – и в первом случае решение было бы устойчиво, а во втором – нет (подобное исследование для случая ОЛСЭ-усилителя и возмущения амплитуды падающей на систему внешней волны $|E|$ при $j = 2340 \text{ A/см}^2$ приведено на рис. 16, б).

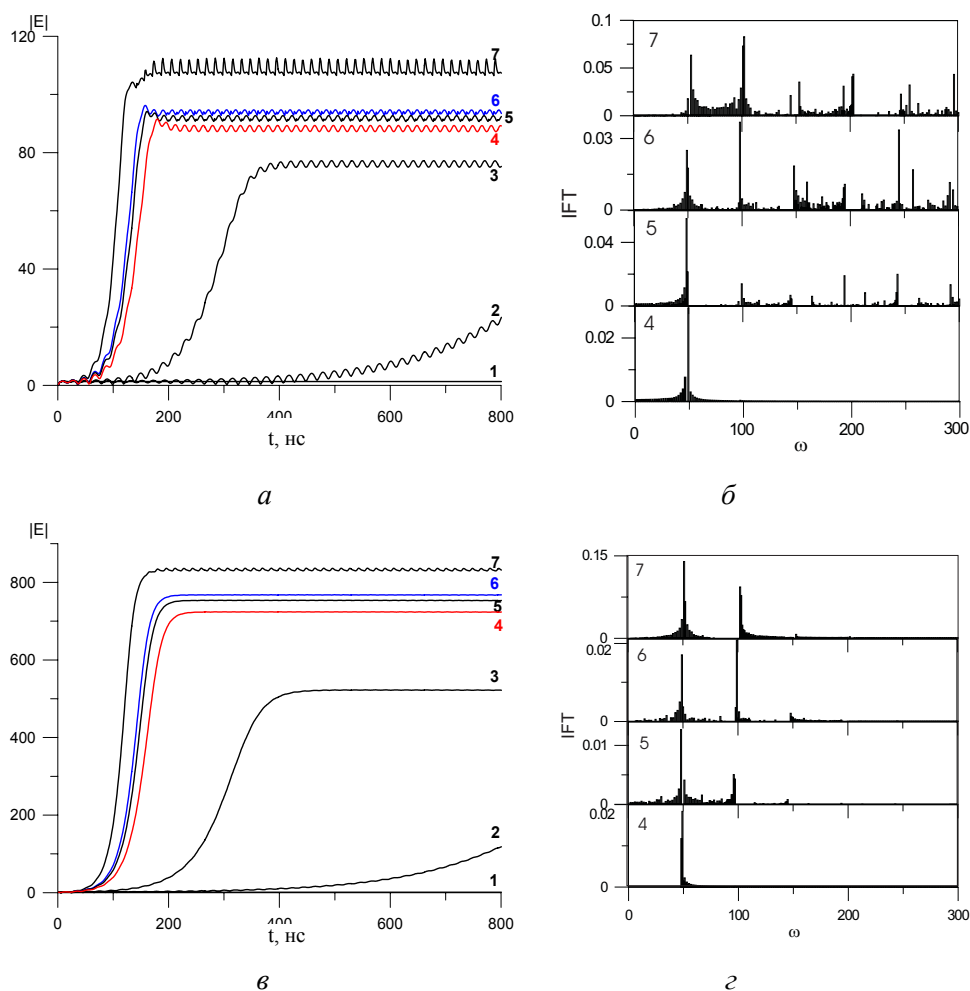


Рис. 14. Режимы периодичности и квазипериодичности для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн в режиме усиления с соответствующими (б) и (з) энергетическими спектрами для следующих параметров плотности тока пучка j :
 1) 350 A/см^2 , 2) 450 A/см^2 , 3) 470 A/см^2 , 4) 515 A/см^2 , 5) 525 A/см^2 ,
 6) 528 A/см^2 , 7) 550 A/см^2

4. Хаос в режиме усиления

Помимо режима генерации ОЛСЭ, представленного на рис. 2–11, мы исследовали режим усиления для амплитуды падающей внешней волны $|E| = 1$ при прочих равных условиях. Оказалось, что после преодоления порога генерации в режиме генерации существует область устойчивого состояния, в то время как в режиме усиления реализуется периодический режим. С увеличением тока пучка режим сильного усиления начинает качественно совпадать с режимом генерации. Это иллюстрируется на рис. 14 и 15.

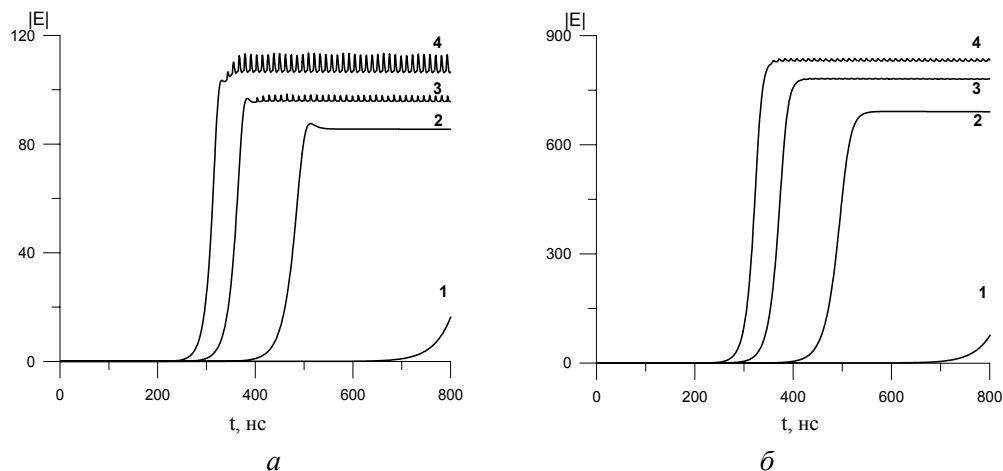


Рис. 15. Режимы устойчивости и периодичности для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн в режиме генерации для следующих параметров плотности тока пучка j : 1) 490 A/cm^2 , 2) 505 A/cm^2 , 3) 530 A/cm^2 , 4) 550 A/cm^2

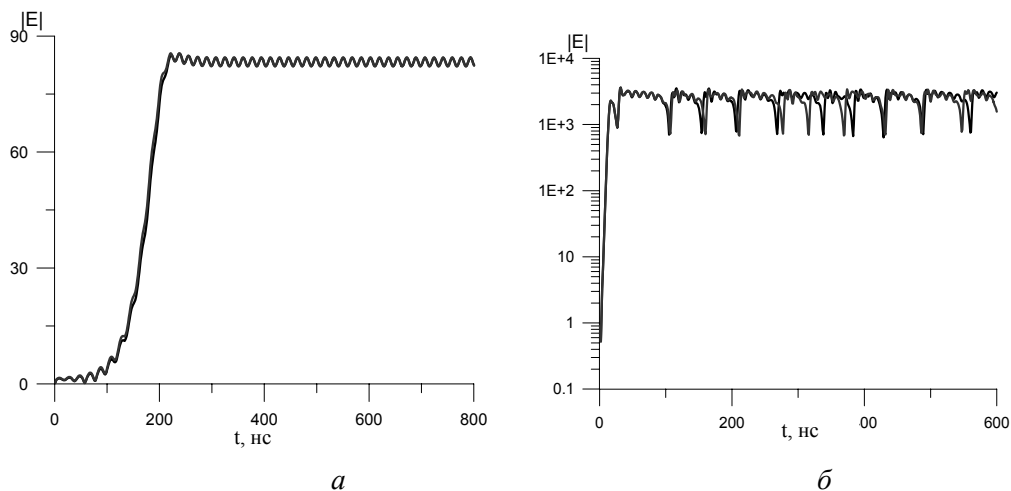


Рис. 16. Решение в случае возмущения начальных данных (а) $j = 500 \text{ A/cm}^2$, $|E| = 1$ (черная кривая) и $|E| = 1.1$ (серая кривая); (б) $j = 2340 \text{ A/cm}^2$, $|E| = 1$ (черная кривая) и $|E| = 1+10^{-15}$ (серая кривая)

Продолжим исследование устойчивости фазовых траекторий динамического хаоса к малым возмущениям начальных условий ОЛСЭ. Исследуем свойства чувствительности полученных решений к возмущениям начального условия $|E| = 1$ для режима усиления ОЛСЭ. На рис.16, *а* приведено решение системы для $j = 500 \text{ A/cm}^2$ для $|E| = 1$ и $|E| = 1.1$. Видно, что периодическое решение устойчиво к возмущению начальных данных, что нельзя сказать о хаотическом решении при $j = 2340 \text{ A/cm}^2$ (рис.16, *б*). Поскольку вычисления проводились с двойной точностью, то даже возмущение 10^{-15} чувствительно проявляется в решении.

5. Параметрические карты осцилляций в ОЛСЭ

В работах [17–19] приведены карты динамических режимов осцилляций ОЛСЭ на параметрических плоскостях: (j, β) , (j, δ) , (j, L) . Полученные картины перехода к хаосу с наличием областей периодичности, квазипериодичности и хаоса продемонстрировали, что среди различных режимов хаоса есть окна периодичности и для прошедших, и для дифрагированных волн, а увеличение плотности тока пучка не приводит к хаосу автоматически.

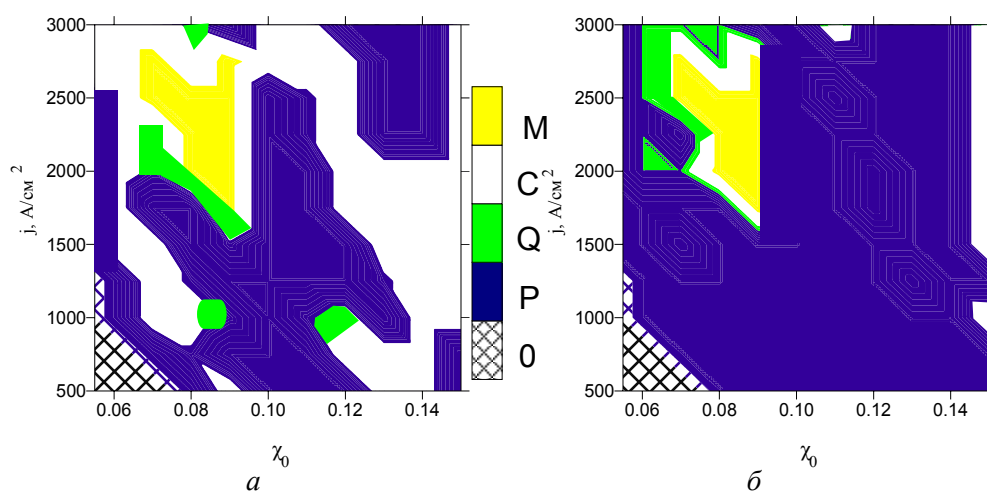


Рис. 17. Параметрическая картина перехода к хаосу в ОЛСЭ при изменении коэффициента $|\chi_0|$ разложения диэлектрической восприимчивости среды в ряд по векторам обратной решетки для прошедшей (*а*) и дифрагированной (*б*) волн.

0 описывает область ниже порога генерации. Р – периодические режимы, Q – квазипериодичность, С – хаос, М – переход между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами

Рассмотрим следующие параметрические карты перехода к хаосу для параметров (j, χ_0) (рис. 17) и (j, l_0) (рис. 18). Изменение диэлектрической проницаемости резонатора может быть вызвано изменением материала и толщины нитей резонатора, а также расстояния между нитями. Анализ диэлектрической проницаемости фотонных кристаллов, используемых в ОЛСЭ в качестве резонаторов, проведен в работе [8]. Системный параметр l_0 описывает волновой вектор проходящей волны внутри резонатора.

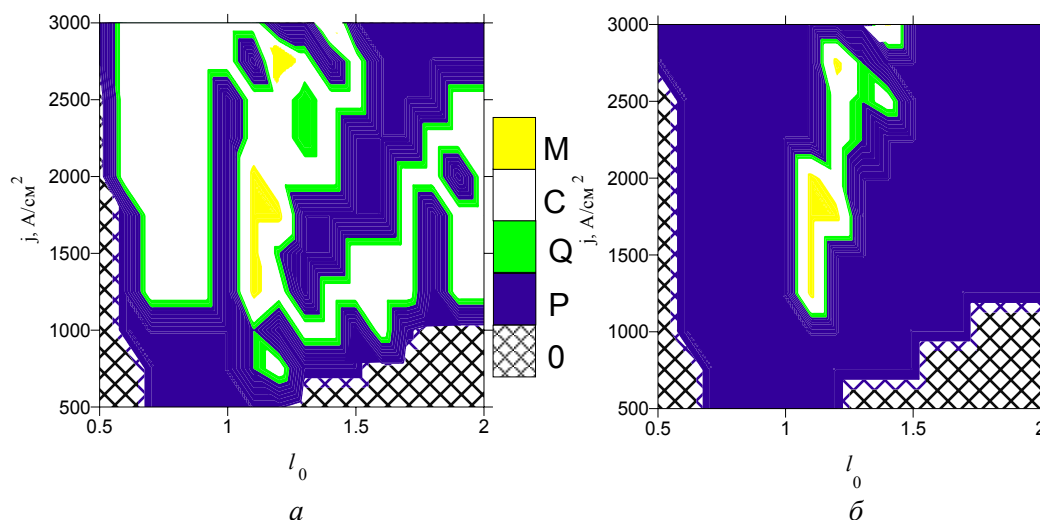


Рис. 18. Сценарий перехода к хаосу в ОЛСЭ при изменении системного параметра l_0 для прошедшей (а) и дифрагированной (б) волн. 0 означает, что плотность тока находится ниже порога. Р – периодические режимы, Q – квазипериодичность, С – хаос, М – переход между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами

Из рисунков 17 и 18 видно, что обе параметрические карты достаточно грубы, для их уточнения требуется большая вычислительная работа. Данные параметрические карты не такие «пестрые», как полученные в [17–19]. Однако здесь, как и ранее в [17–19], наблюдается полоса периодичности вдоль порога генерации, которая затем сложным образом трансформируется в различные хаотические режимы через удвоение периода, бифуркации Хопфа, вводящие в систему новые основные частоты, а также через переходы между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами.

6. Заключение

Разработанные вычислительные алгоритмы могут эффективно применяться при моделировании нелинейных режимов работы ОЛСЭ, что было подтверждено численными экспериментами. Численные результаты согласуются с аналитическими оценками, полученными в линейном приближении. На основании проведенного анализа можно сделать вывод о возможности численно моделировать работу ОЛСЭ в будущих экспериментах.

Поскольку имеется свыше десяти управляющих параметров, то проблема исследования перехода к хаосу в ОЛСЭ представляется очень сложной. Однако даже исследование некоторых переходов между режимами «порядок – хаос» является важным в свете проводимых в НИИ ЯП экспериментальных исследований ОЛСЭ.

Литература

1. Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D. // Physics Let. A. 1984. Vol.102. P. 141.
2. Барышевский В. Г. // Докл. АН СССР. 1988. Т. 299. С. 1336.
3. Барышевский В. Г., Дубовская И. Я., Феранчук И. Д. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. н. 1988, № 1. С. 92.

4. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // J. Phys. D. 1991. Vol. 24. P. 1250.
5. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // Phys. Stat. Sol. 1992. Vol. B169. P. 235.
6. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // NIM. 1994. Vol. A341. P. 274.
7. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // NIM. 1996. Vol. A375. P. 292.
8. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM. 2006. Vol. B252, P. 92.
9. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2002. Vol. A483. P. 21
10. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2003. Vol. A507. P. 137.
11. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2006. Vol. B 252. P. 86.
12. *Batrakov K., Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis. 2005. Vol. 10. P.1.
13. *Батраков К. Г., Сытова С. Н.* // ЖБМ и МФ. 2005. Т. 45, № 4. С. 690.
14. *Batrakov K., Sytova S.* // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2005. Vol. 8. P. 42.
15. *Batrakov K., Sytova S.* // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2005. Vol. 8, N4. P. 359.
16. *Batrakov K., Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis. 2006. Vol. 11. P. 13.
17. *Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis, 2008. Vol. 11. P. 263.
18. *Сытова С. Н.* // Вестник БГУ, сер. физ.-мат. н. 2008. N 9. С. 29.
19. *Sytova S.* // Proc. of the 6th Euromech Nonlinear Dynamics Conference (ENOC-2008). 2008. c7p69r4325.pdf
20. *Пинскер З. Г.* Рентгеновская кристаллооптика. 1982.
21. *Вайнштейн Л. А., Солнцев В. А.* Лекции по сверхвысокочастотной электронике. 1973.
22. *Шустер Г.* Детерминированный хаос: введение. 1984.
23. *Hur M. S., Lee H. J., Lee J. K.* // Phys. Rev. 1998. Vol. E58. P. 936.
24. *Coupric M. E.* // NIM. 2003. Vol. A507. P. 1.
25. *Гинзбург Н. С., Зотова И. В. и др.* // ЖТФ. 2002. Т. 7. С. 83.
26. *Кузнецов С. П., Трубецков Д. И.* // Известия вузов. Радиофизика. 2004. Т. XLVII. С. 383.
27. *Hahn S. L., Lee J. K.* // Phys. Rev. 1993. Vol. E48. P. 2162.
28. *Rosenstein M. T. et al.* // Physica. 1993. Vol. D65. P. 117.
29. <http://www.physionet.org/physiotools/lyapunov/l1d2/>

FIRST STEPS IN INVESTIGATION OF CHAOTIC DYNAMICS IN VOLUME FREE ELECTRON LASER

S. N. Sytova

First lasing of Volume Free Electron Lasers (VFEL) in mm wavelength range was obtained recently [9]. So-called multi-wave volume distributed feedback (VDVB) where electromagnetic waves and electron beam spread angularly one to other is the distinctive feature of VFEL. The principles and theoretical foundations of VFEL operation based on mechanism of VDVB were proposed in [1]. The main VFEL characteristic property is that the increment of instability for an electron beam passing through a spatially-periodic target in degeneration points essentially increased in comparison with single-wave system. This means the noticeable reduction of electron beam current density necessary for achievement the generation threshold for all wavelength ranges regardless the spontaneous radiation mechanism.

In VFEL operation the linear stage investigated in [2–7] quickly changes into the nonlinear one where most of the electron beam energy is transformed into electromagnetic radiation. A detailed numerical analysis of this stage is necessary for experiment design, optimal geometry determination and result processing.

Mathematical model and numerical methods for VFEL nonlinear stage simulation were proposed [13], [14]. They are implemented in computer code VOLC [17]. Different VFEL

geometries were investigated [12–19] numerically. All numerical results are in good agreement with analytical predictions.

In electronic generators and amplifiers such as free electron lasers, backward wave tube, travelling wave tube etc. self-oscillations are due to interaction of electron beam and electromagnetic field under distributed feedback. Investigation of chaos in such devices is of great interest in modern physics. In VFEL chaotic dynamics is induced by such interaction too.

Investigation of chaos in VFEL is important in the light of experimental development of VFEL at Research Institute for Nuclear Problems. As more than ten control parameters are in the system it is very complicated to investigate the full picture of possible chaotic behaviour in VFEL. We restricted ourselves to investigate here the chaotic behaviour in two-wave VFEL for Bragg geometry in amplifier and oscillator generation regimes. We considered some cases of possible root to chaos in VFEL for laser intensity with corresponding space portraits and attractors. Solution bifurcation points corresponding to transitions between different regimes of generation are considered. Parametric maps with respect to electron beam current and (1) resonator susceptibility, (2) system parameter present complicated root to chaos with windows of periodicity and quasiperiodicity.

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА СПЕЦИАЛЬНЫХ ВЫСОКОДОБРОТНЫХ РЕЗОНАНСНЫХ СИСТЕМ И МИКРОВОЛНОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

**В. А. Карпович, Г. Я. Слепян, В. Н. Родионова, Г. И. Волынец,
А. А. Савук, О. В. Танана, И. А. Гринчук**

Резонансные системы широко применяются в современной радиотехнике для частотной фильтрации электромагнитных колебаний, реализации обратной связи при их усилении и генерации. Явление резонанса и резонансные системы широко используются при измерении характеристик материальных сред, для создания различных промышленных установок и оборудования, в основе которых лежит принцип накопления электромагнитной энергии в резонансном объеме.

Наиболее актуальными задачами, возникающими при теоретическом и экспериментальном исследовании принципов создания резонансных систем в СВЧ диапазоне, являются разработка методик расчета широкополосных элементов связи резонансных систем с одномодовыми волноводами и техническое приложение полученных результатов для разработки установок для измерения электродинамических характеристик композитных материалов в СВЧ диапазоне, а также технологического оборудования для микроволнового нагрева, стерилизации, сушки различных диэлектрических материалов.

1. Новые типы элементов связи высокодобротных резонансных систем и прямоугольных волноводов

Одним из главных требований, предъявляемых к универсальному измерительному резонатору, является высокая собственная добротность в сочетании с широким диапазоном перестройки частоты. Поэтому весьма важным является вопрос о широкополосном элементе связи этого резонатора с СВЧ-трактом. В настоящее время ведется активный поиск оптимальных устройств связи с линиями передачи [1–6]. Практическая реализация бездиафрагменных элементов связи в коротковолновой части длин радиоволн вызывает технологические трудности изготовления [7, 8]. Совершенствование технологии и конструкции может эти трудности уменьшить, но представляет интерес и поиск новых физических принципов реализации элемента связи резонатора с прямоугольным волноводом в данном диапазоне частот. Один из таких принципов – использование в качестве элемента связи полупрозрачной решетки и разработка устройства связи на основе сужающегося волновода. Одним из главных достоинств таких элементов является возможность управлением добротностью связи $Q_{св}$ в широких пределах путем вариации конструктивных параметров. Другое существенное качество – повышенная технологичность (решетка может быть нанесена на диэлектрическую подложку и изготовлена средствами микроэлектроники), а сужающийся волновод может быть гальванически «наращен» на технологическую оправку.

Конструкция элемента связи на основе полупрозрачной решетки показана на рис.1. Поле в волноводе записывается аналогично [9] в виде

$$\vec{H} = \frac{\vec{x}_0}{W_0} \frac{h_1}{k} \exp(-jh_1 z) A_1 \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right), \quad (1)$$

где h_1 – постоянная распространения основной волны; W_0 – волновое сопротивление свободного пространства; k – волновое число волны в среде; x – декартова координата; a – размер широкой стенки волновода; A_1 – амплитудный коэффициент, выражаемый равенством

$$A_1 = -\frac{1}{N_1} \int (\vec{y}_0 \vec{E}) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dS, \quad (2)$$

S_0 – апертура решетки (прямоугольник $c \times a'$); $\vec{E}$ – поле в апертуре решетки; N_1 – норма волны; $\vec{x}_0, \vec{y}_0$ – единичные векторы.

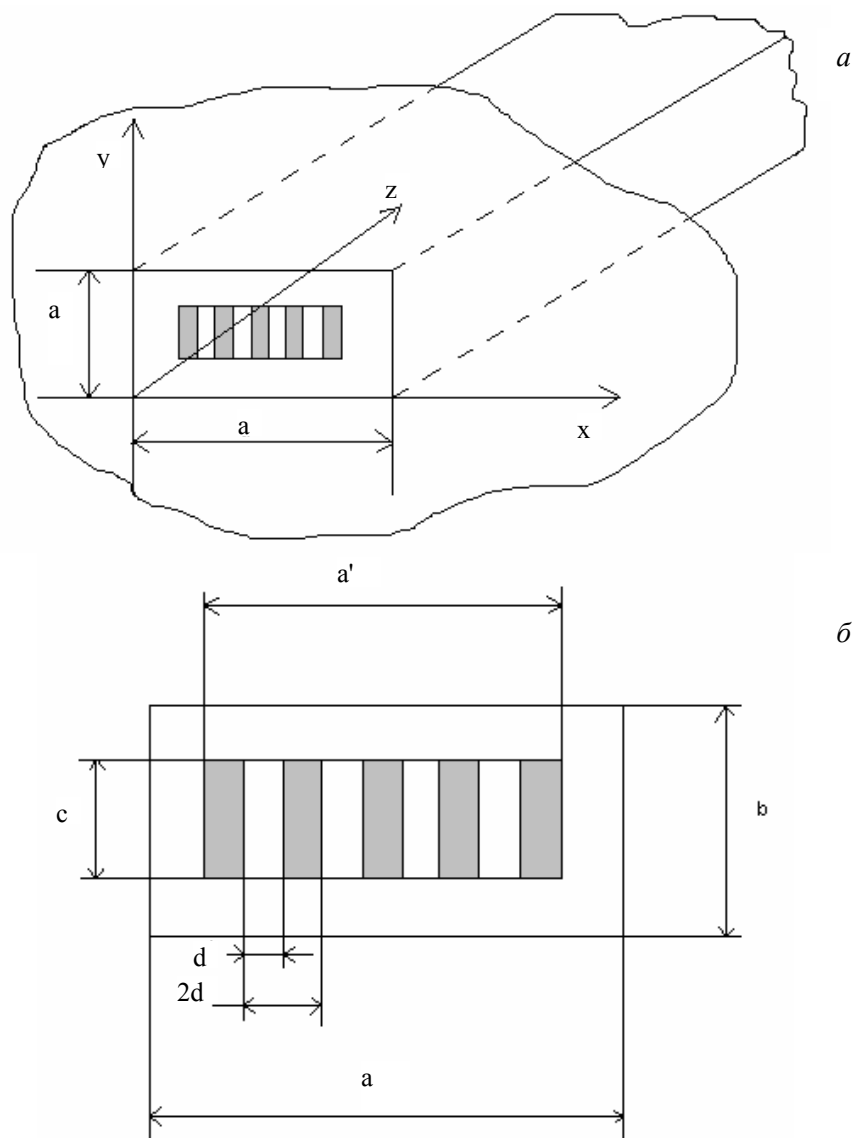


Рис. 1. Конструкция элемента связи: а – решетка связи в прямоугольном волноводе; б – конфигурация решетки связи

Вначале вычислим A_1 в пренебрежении диэлектрической подложкой, а затем выведем поправочный коэффициент, учитывающий ее влияние. Воспользуемся двухсторонними граничными условиями импедансного типа, имеющими в наших обозначениях вид [10]

$$E_y^+ - E_y^- = \frac{jkl_0}{2} W_0 (H_x^+ - H_x^-), \quad (3)$$

$l_0 = \frac{2d}{\pi} \ln\left(\frac{1}{\cos\theta}\right)$, где $\theta = \pi\alpha/2d$, α – полуширина ленты, d – полупериод решетки, индексами $\pm$ обозначены поля внутри резонатора и волновода соответственно.

Особый интерес для элемента связи представляет частный случай редкой решетки, когда $\theta \ll 1$. Тогда $\cos\theta \cong 1 - \theta^2/2$ и для l_0 получаем приближенное равенство $l_0 \approx \pi\alpha^2/4d$. В этом приближении является оправданным использование упрощенного граничного условия (3) вместо более полной системы граничных условий, также приведенной в [10].

Используя (3), получаем

$$|A_1| = \frac{kl_0 W_0 c}{N_s} H_{0x} \int_0^{a'/2} \cos \frac{\pi x'}{a} dx' = \frac{kl_0 W_0 a c H_{0x}}{\pi N_s} \sin\left(\frac{\pi a'}{2a}\right), \quad (4)$$

H_{0x} – поле рабочего колебания резонатора на поверхности решетки. Для сравнения приведем формулу для $|A_1|$ в случае круглого отверстия [7]:

$$|A_1| = \frac{4}{3} r^3 \omega \mu_0 H_{0x} \frac{1}{N_s}, \quad (5)$$

где r – радиус отверстия, $\omega = 2\pi f$, μ_0 – магнитная проницаемость вакуума.

Сравнивая (5) с (4), мы приходим к заключению, что решетка эквивалентна круглому отверстию связи с эффективной магнитной поляризуемостью

$$M_{эф} = l_0 c I = \frac{l_0 a c}{\pi} \sin\left(\frac{\pi a'}{2a}\right). \quad (6)$$

Возможен также и другой способ вычисления $M_{эф}$, основанный на формуле для магнитной поляризуемости одиночной узкой щели с прямоугольной апертурой ($M \approx 4\pi\alpha^2 c/16$). Тогда

$$M_{эф} \cong \frac{\pi}{16} \frac{4\alpha^2 c}{2d} \sum_{p=1}^N 2d \sin\left[\frac{\pi}{a}(x_p + 2pd)\right], \quad (7)$$

где N – число щелей в решетке. Суммируя конечный ряд в (7), приходим к равенству $M_{эф} \approx \pi\alpha^2 c I/4d$, при условии $\theta \ll 1$ совпадающему с (6). Подобное

совпадение формул, полученных из различных исходных предпосылок, является дополнительным свидетельством правильности произведенных выкладок.

Перейдем к учету влияния диэлектрической подложки (рис. 2). Прежде всего отметим, что для поля рассматриваемой поляризации (электрическая компонента параллельна щелям) наличие на поверхности решетки границы раздела сред с различными ϵ не изменяет граничного условия (3) [12, 13].

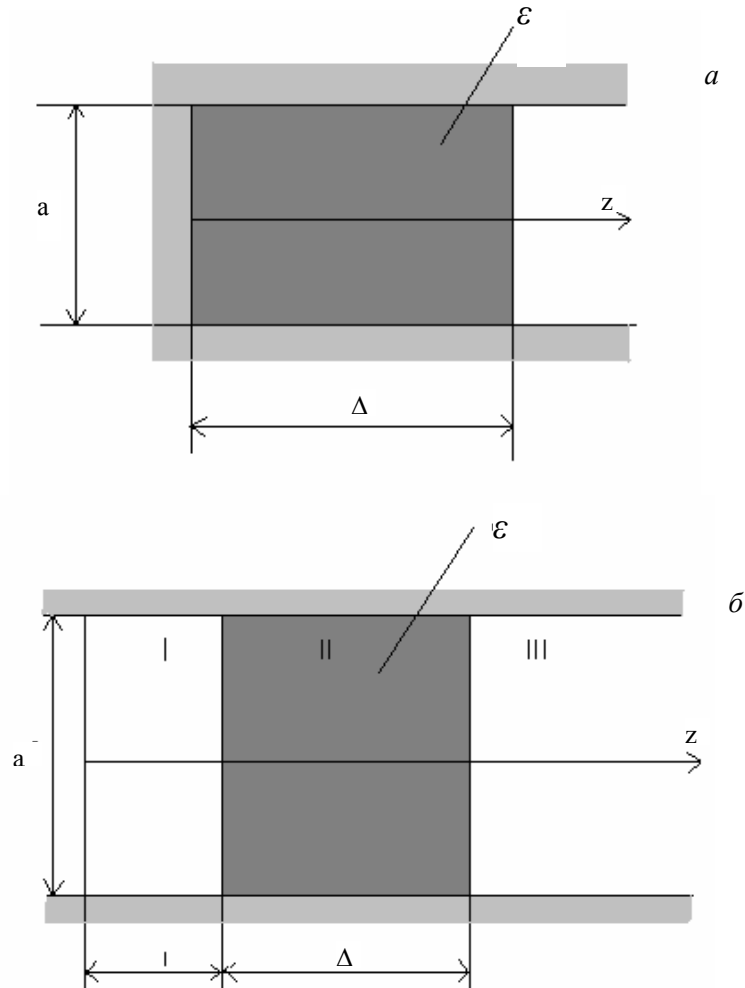


Рис. 2. Геометрия модельной задачи для возбуждения полубесконечного волновода с диэлектрической пластиной магнитным током: *a* – схема возбуждения магнитным током, расположенным на торцевой стенке; *б* – конфигурация частичных областей для решения ключевой задачи

Наличие подложки приводит к изменению амплитуды волн, возбуждаемых элементом связи, за счет эффектов парциального отражения от двух границ подложки. Чтобы учесть этот эффект фактически нам необходимо рассмотреть ключевую задачу о возбуждении полубесконечного прямоугольного волновода с диэлектрической пластиной магнитным током, расположенным на торцевой

стенке (рис. 2, а). Анализ удобно начать с более общей структуры (рис. 2, б) и лишь потом перейти к пределу $l \rightarrow 0$. Используем метод частичных областей; частичные области показаны на рис. 2, б римскими цифрами. Поля n -й собственной волны в каждой из частичных областей представляются в виде

$$\left. \begin{aligned} f_n^I(z) &= A_n \exp(jh_n z) + B_n \exp(-jh_n z), \\ f_n^{II}(z) &= C_n \exp(jh_n^\varepsilon z) + D_n \exp(-jh_n^\varepsilon z), \\ f_n^{III}(z) &= E_n \exp(jh_n z), \end{aligned} \right\}, \quad (8)$$

где B_n, C_n, D_n, E_n – неизвестные коэффициенты, $h_n = \sqrt{k^2 - (n\pi/a)^2}$,

$h_n^\varepsilon = \sqrt{k^2 \varepsilon - (n\pi/a)^2}$, $A_n = \frac{j\varepsilon_0}{h_n} \int_{\Sigma} \vec{f} \vec{F}_n d\Sigma$ – амплитуда n -й волны в волноводе без

пластины, вычисленная по методике [11] ($\vec{f}$ – плотность магнитного тока, $\vec{F}_n$ – n -я собственная функция магнитного вектор-потенциала). Цель проводимых ниже вычислений – выразить E_n через A_n , пользуясь граничными условиями на границах раздела частичных областей. Они элементарны, поэтому сразу приведем окончательный результат. В пределе $l \rightarrow 0$ получаем

$$E_n = A_n \exp[j(h_n^\varepsilon - h_n)\Delta] \left(\frac{a_n - b_n}{a_n - b_n e^{2jh_n^\varepsilon \Delta}} \right), \quad (9)$$

где $a_n = (1 + h_n^\varepsilon/h_n)^2$, $b_n = (1 - h_n^\varepsilon/h_n)^2$.

Из (9) получаем $|E_n|^2 = \beta_n |A_n|^2$, где $\beta_n = \frac{(a_n - b_n)^2}{a_n^2 + b_n^2 - 2a_n b_n \cos(2h_n^\varepsilon \Delta)}$.

Введя обозначение $y_n = \left(\frac{h_n^\varepsilon}{h_n} \right)^2$, можно переписать β_n в виде

$$\beta_n = \frac{1}{1 + \frac{(1 - y_n)^2}{4y_n} \sin^2(h_n^\varepsilon \Delta)}. \quad (10)$$

Равенство (10) фактически решает поставленную задачу. Для нас представляет интерес частный случай его при $n = 1$, характеризующий основную волну. Для него окончательный результат представляется в виде

$$\beta_1 = \beta \approx \left\{ 1 + \frac{(\varepsilon - 1)^2 \sin^2[k\Delta \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2}]}{4[1 - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2][\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2]} \right\}^{-1} \quad (11)$$

Соотношение (11) есть форма решения, наиболее удобная для численных оценок и качественного анализа. В соответствии с ним, учет влияния подложки сводится к замене $M_{эфф} \rightarrow \sqrt{\beta} M_{эфф}$. Далее, для $Q_{св}$ можно применить соотношение, полученное для диафрагменных элементов в [7]:

$$Q_{св} \approx \frac{ab\lambda^2 L^2}{32\pi\beta M_{эфф}^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2} \sqrt{\frac{L}{2r_0} \left(1 - \frac{L}{2r_0}\right)}}, \quad (12)$$

где a и b – размеры выходного волновода, λ – длина волны, r_0 – радиус кривизны зеркал, L – расстояние между зеркалами, $M_{эфф}$ – определяется равенством (6), а коэффициент β – соотношением (11). Проанализируем физический смысл соотношения (12). Из него видно, что управлять величиной $Q_{св}$ в широких пределах можно, варьируя $M_{эфф}$ путем изменения как размеров решетки a', c , так и коэффициента заполнения $\frac{\alpha}{d}$. Последнее остается единственной возможностью, если из конструктивно-технологических соображений решетку целесообразно выполнить занимающей все сечение волновода ($a' = a$, $b = c$). Далее, так как $\beta \leq 1$, влияние подложки приводит к деполяризации решетки и, как следствие, уменьшению связи при тех же геометрических размерах элемента. Для диэлектриков типа «поликор» ($\varepsilon \approx 10$) уменьшение связи может быть существенным, но его можно компенсировать, выбирая толщину подложки в соответствии с условием

$$k\Delta \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2} = \pi.$$

Полная компенсация возможна только на определенной частоте, но частичная компенсация реализуема в достаточно широком диапазоне.

Диэлектрические подложки позволяют существенно повысить рабочие частоты диафрагменных элементов связи, описанных в [7]. Ограничения на их рабочие частоты, как известно, связаны с уменьшением размера отверстия при росте частоты технологическими трудностями их изготовления. Подложка позволяет реализовать заданное $Q_{св}$ при большем размере отверстия и изготовить диафрагменный элемент средствами микроэлектроники. При этом в качестве материала подложки целесообразно использовать вещества со значительными ε (например, поликор), а оптимальную толщину выбирать в соответствии с условием

$$k\Delta_{opt} \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2} = \frac{\pi}{2},$$

где k соответствует средней частоте рабочего диапазона.

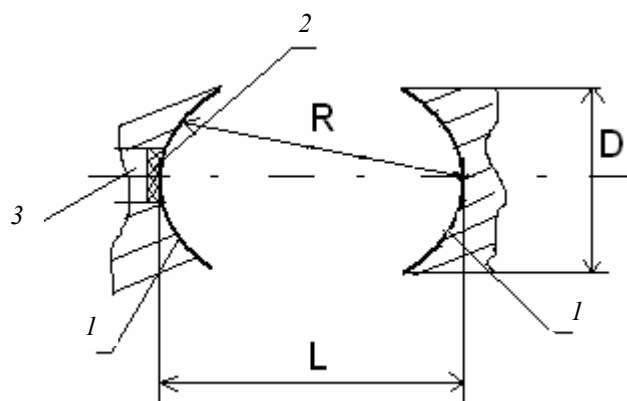


Рис. 3. Конструкция резонатора с элементом связи: 1 – зеркала ОР; 2 – элемент связи; 3 – возбуждающий волновод

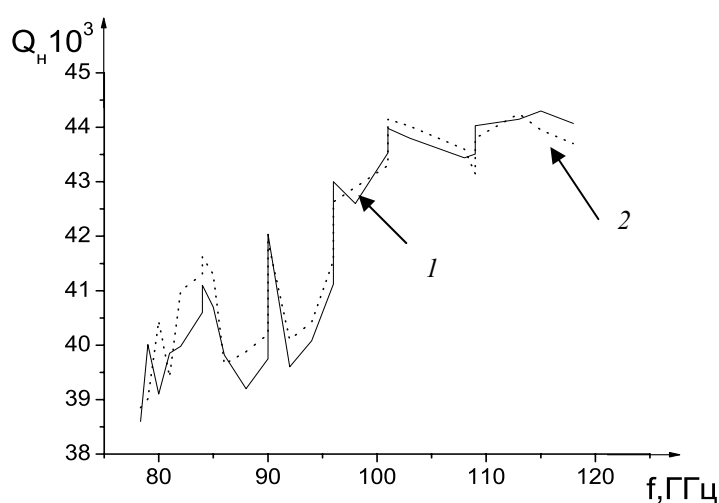


Рис. 4. Экспериментальные данные добротности открытого резонатора с различными устройствами связи: 1 – резонатор с плоской щелевой решеткой; 2 – резонатор с диафрагменным устройством связи

Параметром, характеризующим оптимальное согласование резонатора с СВЧ-трактом, является величина коэффициента стоячей волны (КСВ). Измерение КСВ проводили по стандартной методике [14].

Измерение КСВ производилось для устройства связи на основе дифракционной решетки, которая была установлена в открытый резонатор, в диапазоне частот 78–118 ГГц (рис.3).

Кроме измерения КСВ, экспериментально исследовался также и один из важнейших параметров – добротность резонатора (Q).

Результаты экспериментальных исследований приведены в табл. 1.

Результаты экспериментальных исследований ОР с новым элементом связи

f , ГГц	$L_{пр}$, дел	КСВ	Q_n
78.33	0.01	1.25	38600
79.01	1.38	1.6	40010
80.0	2.96	1.21	39100
81.0	4.82	1.3	39850
82.0	6.43	1.34	39980
84.0	9.7	1.41	40600
84.0	0.78	1.48	41100
85.0	2.42	1.38	40700
86.0	4.07	1.23	39820
88.0	7.34	1.18	39200
90.0	10.38	1.22	39750
90.0	0.68	1.37	42040
92.0	4.0	1.14	39600
94.0	7.16	1.26	40080
96.0	10.81	1.39	41120
96.0	0.42	1.48	43000
98.0	3.93	1.33	42600
101.0	9.75	1.46	43530
101.0	1.05	1.52	43980
103.0	3.7	1.54	43800
108.0	9.85	1.34	43440

На рисунке 4 приведены сравнительные экспериментальные данные нагруженной добротности Q_n резонатора с элементом связи на основе плоской решетки и нагруженной добротности резонатора с диафрагменным элементом связи в диапазоне 78–118 ГГц. Анализируя результаты, можно констатировать, что применение решетки практически не ухудшило нагруженную добротность резонатора.

Представляют также значительный интерес бездиафрагменные элементы связи через плавнонерегулярные волноводные переходы. Такие элементы связи обеспечивают более высокую селекцию возбуждения мод, чем элементы с малыми отверстиями.

Рассматривались два типа резонаторов: резонатор с двумя идентичными сферическими зеркалами (рис. 5) и резонатор, одно из зеркал которого сферическое, а другое – плоский диск (рис. 6).

Элемент связи расположен в центре зеркала и представляет собой узкую щель размером $2a_1 \times b$ ($2a_1 \ll b$). К щели подсоединен плавный волноводный переход к волноводу связи стандартного сечения, ориентированный ортогонально поверхности зеркала. Плавный переход характеризуется законом нерегулярности $a = a(z)$, $b = \text{const}$, который в теоретическом анализе мы будем предполагать произвольным.

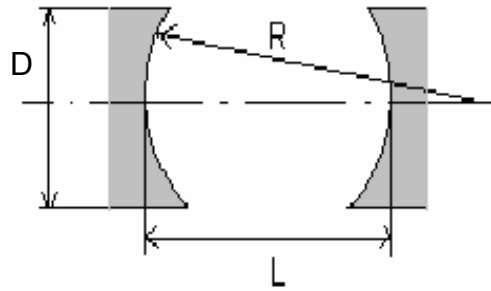


Рис. 5. Геометрия резонатора с двумя сферическими зеркалами

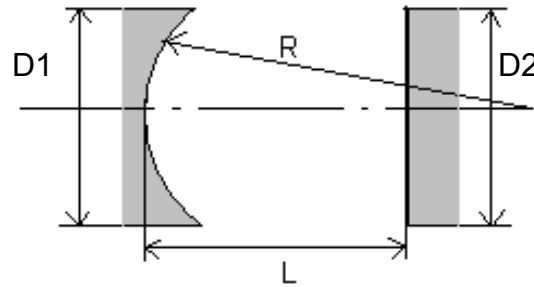


Рис. 6. Геометрия резонатора с одним сферическим и одним плоским зеркалом

Важнейшим физическим параметром элемента связи является добротность связи отдельного собственного колебания TEM_{0nq} , выражаемая соотношением:

$$Q_{CB} = \pi f_0 N / \Sigma, \quad (13)$$

где f_0 – резонансная частота; Σ – средняя за период мощность, поступающая из резонатора в волновод связи; N – норма колебания.

Конфигурация модельной задачи для электродинамического анализа элемента связи показана на рис 7.

В работе [15] приведен расчет добротности такого элемента связи. Предложено перейти от реального элемента связи к его прототипу, в котором узкие «электрические» стенки заменяются «магнитными» стенками. Это позволило перейти от сложной трехмерной электродинамической задачи к ключевой двумерной задаче, решаемой более простыми методами. Такой подход нашел широкое применение при расчете матриц рассеяния различных неоднородностей в микрополосковых линиях (модели Олинера [16]). Оказывается, что пределы его применимости значительно шире интегральных схем СВЧ: в частности, он может быть применен в задачах связи квазиоптических открытых резонаторов с прямоугольными волноводами.

Условие физической эквивалентности прототипа данному элементу связи заключается в равенстве волноводных импедансов рабочих мод в соответствующих сечениях элемента связи и его прототипа. Для этого размер широкой

стенки прототипа должен быть равен $b_{011} = b\nu$, где $\nu = (1 - (\lambda/2b)^2)^{1/2}$. Структура поля рабочих колебаний TEM_{0nq} в резонаторе практически не будет меняться, если «магнитные» стенки будут продолжены в резонатор. В частности, такая олинеровская модель позволяет вычислить Σ в волноводе. Мы представляем колебания в резонаторе, когда трехмерные гауссовские пучки в ключевой задаче переходят в плоские волны: по оси x в виде гауссовского пучка, а по оси y в виде волноводного. Σ будет такой же, как и в случае дифракции одного луча на одном зеркале с элементом связи, т. е.

$$\Sigma = \frac{2a_0 |T_0|^2 E_0^2 b \nu d}{W_0 L}, \quad (14)$$

где $2d$ – фокусное расстояние; $W_0 = 120\pi\Omega$; T_0 – коэффициент передачи.

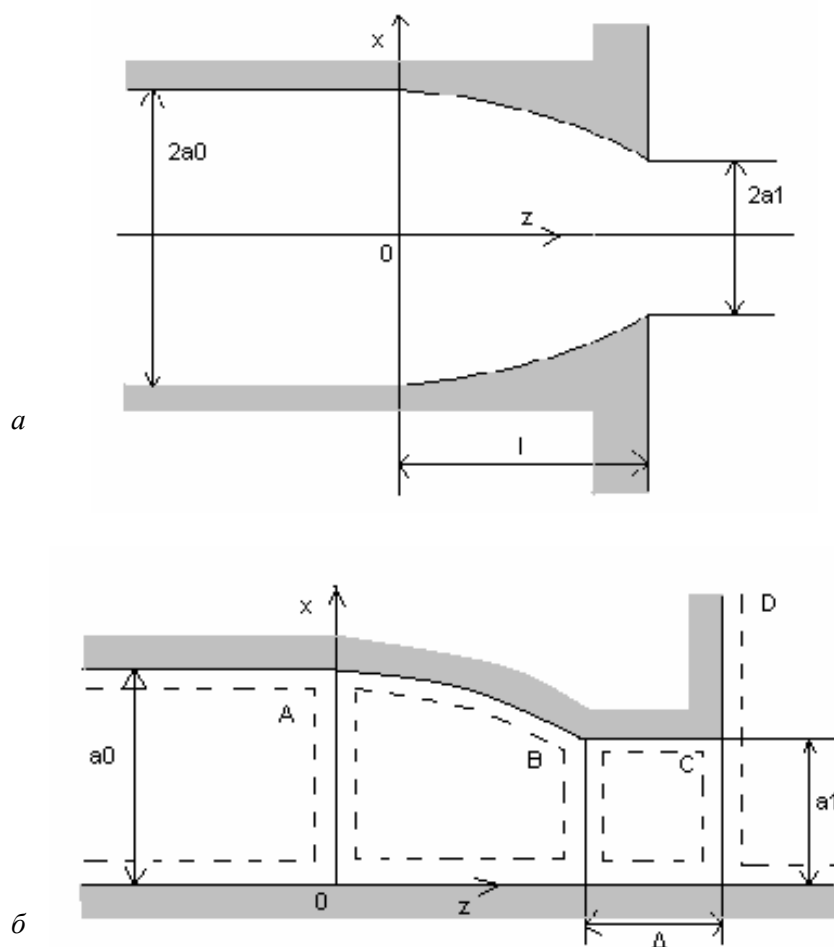


Рис. 7. Модельные задачи для электродинамического анализа элемента связи

Следовательно, для Q_{CB} :

$$Q_{CB} = \frac{\pi L^2}{\alpha \nu a_0 b |T_0|^2} \left(\frac{L}{\alpha R} \left(1 - \frac{L}{\alpha R} \right) \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (15)$$

где L – расстояние между зеркалами; R – радиус кривизны зеркал; α – коэффициент, зависящий от типа резонатора ($\alpha = 2$ для резонатора a ; $\alpha = 1$ для резонатора b).

Индексы собственного колебания n, q входят в $\sum$ через L и T_0 : эти величины вычисляются на резонансных частотах, определяемых индексами n, q . Использование формулы для $\sum$ требует вычисления или оценки $|T_0|^2$ из вспомогательной ключевой задачи. Простые аналитические оценки его затруднительны, но возможен высокоэффективный и строгий численный метод.

Формулы для $\sum$ и Q_{CB} неприменимы в узких окрестностях частот вырождения диагонализированной кратности. Это связано с тем, что их вывод основан на теории малых возмущений (элемент связи мало изменяет величины ω_0 и N).

Для вычисления T_0 было проведено решение ключевой задачи, показанной на рис. 7, а, заключающееся в решении двумерного уравнения Гельмгольца:

$$\nabla_{xz}^2 \varphi + k^2 \varphi = 0,$$

для y – компоненты магнитного поля ($\varphi = H_y$), удовлетворяющей граничному условию Неймана на поверхности структуры, условию излучения на бесконечности и условию Мейкснера на ребре.

Вначале рассматривали модифицированную структуру, показанную на рис. 7, б; к пределу $\Delta \Rightarrow 0$ переходили на заключительной стадии решения.

Подобная модификация рассматриваемой геометрической области часто используется в полуаналитических методах решения краевых задач электродинамики [17, 18] (полуобращение, метод вычетов, метод обобщенных матриц рассеяния и т. д.). Суть ее в том, что она позволяет легко выделить часть полного оператора, подлежащую аналитическому обращению. Применили неполный метод Галеркина с полуобращением сингулярных операторов в граничных условиях. Процедура полуобращения идентична предложенной в работе [19]. В областях A и C применялось разложение по собственным волнам регулярного волновода. В области $D(z > 1 + \Delta)$

$$\varphi(x, z) = \int_0^\infty A(\alpha) \cos \alpha x \exp(-\gamma(z-1-\Delta)) d\alpha + 2A_0 \cos k(z-1-\Delta), \quad (16)$$

где A_0 – амплитуда падающей плоской волны, $\gamma = \sqrt{\alpha^2 - k^2}$; $A(\alpha)$ – неизвестная спектральная амплитуда.

В нерегулярной области B использовали разложение

$$\varphi(x, z) = \sum_{n=0}^\infty P_n(z) \cos \frac{n\pi}{a(z)} (x - a(z)), \quad (17)$$

где $\bar{P} = \{P_n(z)\}$ – неизвестная вектор-функция.

Для нее при помощи стандартной схемы неполного метода Галеркина [20] получили систему собственных дифференциальных уравнений:

$$\bar{P}''(z) + H(z)\bar{P}'(z) + B(z)\bar{P}(z) = 0, \quad (18)$$

где $H(z), B(z)$ – заданные матрицы-функции.

Сшивание полей на границах частичных областей $z = 0, z = L, z = L + \Delta$ приводит к следующей системе равенств:

$$\begin{cases} \bar{P}'(0) + (\zeta_0 - \Gamma_0)\bar{P}(0) = 0, \\ \bar{P}(0) = \bar{T}, \\ \bar{P}'(l) + (\zeta_1 - \Gamma_1)\bar{P}(l) = 2\Gamma_1 E^+ \bar{c}, \\ \bar{P}(l) = E^- \bar{b} + E^+ \bar{c}, \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty A(\alpha) \cos \alpha x d\alpha + 2A_0 &= \sum_{n=0}^\infty (c_n + b_n) \cos \frac{n\pi}{a_1} x, & 0 < x < a_1 \\ \int_0^\infty A(\alpha) \gamma \cos \alpha x d\alpha &= \sum_{n=0}^\infty (c_n - b_n) \gamma_n^{(1)} \cos \frac{n\pi}{a_1} x, & 0 < x < a_1 \\ \int_0^\infty A(\alpha) \gamma \cos \alpha x d\alpha &= 0, & a_1 < x < \infty \end{aligned}$$

где $\bar{T}$ – вектор амплитуд собственных волн, уходящих от нерегулярного участка в области A ; $\bar{b} = \{b_n\}, \bar{c} = \{c_n\}$ – векторы амплитуд соответственно прямых и встречных собственных волн в области C ; Γ и E – диагональные матрицы с элементами:

$$\begin{aligned} \Gamma_{0,1mn} &= \delta_{mn} \gamma_n^{(0,1)}, \gamma = \sqrt{\alpha^2 - k^2}, \\ \gamma_n^{(0,1)} &= \sqrt{(n\pi/a_{0,1})^2 - k^2}, E_{mn} \pm = \delta_{mn} \exp(\mp \gamma_n^{(1)} \Delta), \end{aligned}$$

δ_{mn} – символ Кронекера. Выражения для элементов матриц $\zeta_0, \zeta_1, H(Z), B(Z)$ приведены в работе [21].

Следующий этап состоял из исключения $\bar{b}$ и $\bar{c}$ из (7) (т. е. выражения их через $\bar{P}(l)$). В результате получается граничное условие для $\bar{P}$ при $z = 1$, которое образует двухточечную краевую задачу для вектор-функции $\bar{P}(z)$. Это граничное условие имело вид

$$\bar{P}'(l) + (\zeta_1 - \Gamma_1)\bar{P}(l) + \Gamma_1 V^{-1} \bar{P}(l) = \Gamma_1 V^{-1} \Gamma_1^{-1} Q W^{-1} \bar{r}, \quad (20)$$

где $V = I + \Gamma Q W^{-1} Y$.

$$Y_{pn} = F_n^v(n\pi) = \frac{J_{2\pi v}(n\pi)}{(2n\pi)^v}, v = \frac{\pi + 2\text{arctg}(a'l)}{6\pi + 4\text{arctg}(a'l)}.$$

$J_\mu(x)$ – функция Бесселя порядка μ ;

$$\begin{aligned}
Q_{nm} &= -(2 - \delta_{n0}) \pi F_m(n\pi), W = W^{(1)} + W^{(2)}; \\
W_{pm}^{(1)} &= -a_1 2^{-4\nu} \frac{\Gamma(1+2\nu)\Gamma(m+p)(1-\delta_{p+m,0})}{\Gamma(1+m-p+\nu)\Gamma(1-m+p+\nu)\Gamma(1+m+p+2\nu)} - \\
&\quad - \frac{\pi \delta_{p0} \delta_{m0}}{2^{4\nu+1} \Gamma^2(\nu+1) \gamma_0^{(1)}} + a_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F_p^{(\nu)}(n\pi) F_m^{(\nu)}(n\pi)}{n\pi}, \\
W_{pm}^{(2)} &= -2a_1 \int F_p^{(\nu)}(\alpha a_1) F_m^{(\nu)}(\alpha a_1) q_{mp}(\alpha) d\alpha + a_1 \sum_{n=1}^{\infty} F_p^{(\nu)}(n\pi) F_m^{(\nu)}(n\pi) \varepsilon_n, \\
\varepsilon_n &= \frac{1}{\gamma_n^{(1)} a_1} - \frac{1}{n\pi}, \\
q_{mp}(\alpha) &= \left(\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{\alpha} \right) + \delta_{m+n,0} \frac{1}{\alpha},
\end{aligned}$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

Вектор r характеризует возбуждающий источник и определяется

$$r_n = 2A_0 F_n^{(\nu)}(0).$$

Для численного решения полученной краевой задачи была выполнена редукция всех матриц и векторов к их конечномерным аналогам [21]. После этого был использован метод направленной ортогонализации.

Интегралы в $W_{pm}^{(2)}$ представлялись рядами по степеням ka_1 , которые с привлечением двойной точности эффективно суммируются до $ka_1 < 10$. Суммирование медленно сходящихся рядов в $W_{pm}^{(1)}$ проводилось по методике [22].

Искомый коэффициент T_0 выражается через решение ключевой задачи равенством $T_0 = P_0(0)$.

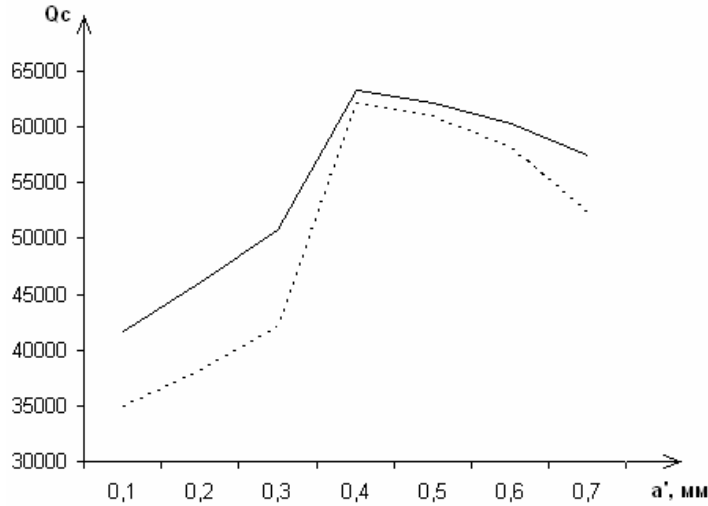


Рис. 8. Расчетная зависимость добротности связи от размера a_1 окна связи

Размеры плавных возбуждающих волноводов

Сечение возбуждающего волновода, $a \times b$, мм	5.2×2.6	2.4×1.8	1.6×0.8
Сечение щели на зеркале, $a_1 \times b$, мм	5.2×0.45	2.4×0.35	1.6×0.25



Рис. 9. Зеркало ОР с плавным волноводным переходом

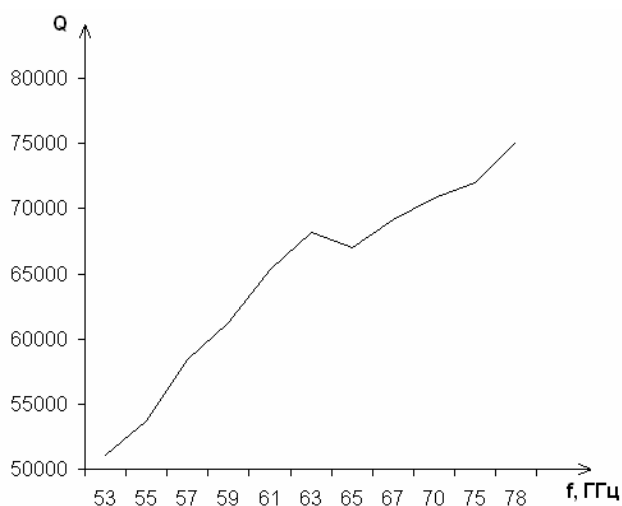


Рис. 10. Экспериментальные результаты частотной зависимости нагруженной добротности исследуемых резонаторов

Результаты расчетов добротности связи открытых резонаторов в диапазонах 53–78 ГГц; 78–18 ГГц; 118–178 ГГц в зависимости от размеров окна связи приведены на рис. 8 (сплошная линия – экспериментальные данные, пунктир – расчетные данные).

Проектировались и исследовались клинообразные нерегулярные переходы с $a(z) = a_0 + (a_1 - a_0)z/l$. В табл. 2 приведены размеры плавных возбуждающих волноводов каждого из ОР.

Параметром, характеризующим согласование резонатора с СВЧ трактом, является величина коэффициента стоячей волны (КСВ). Измерения КСВ проводили по стандартной методике [23]. В качестве источника сигнала использовались высокостабильные твердотельные генераторы, разработанные нами (нестабильность частоты $< 10^{-5}$, выходная мощность > 50 мВт).

На рисунке 9 представлено зеркало ОР с плавным волноводным переходом. Результаты экспериментального исследования нагруженной добротности открытых резонаторов в диапазонах 53–78 ГГц; 78–118 ГГц; 118–178 ГГц приведены на рис. 10.

2. Измерение поглощающих и отражающих характеристик наноразмерных углеродных композитов в СВЧ диапазоне радиоволн

Электродинамика наноразмерных углеродных композитов вызывает в последние годы все возрастающий интерес широким кругом прикладных возможностей для таких сред в современной радиофизике. Прикладные возможности нанокompозитов в значительной степени обусловлены тем, что их материальные характеристики могут кардинально отличаться от материальных характеристик составляющих их компонент. Нанокompозитные среды могут обладать совершенно необычными электромагнитными свойствами, не имеющими аналогов среди естественных сред. Пример – среды с отрицательным значением показателя преломления (так называемые среды Веселаго). Становятся актуальными экспериментальные исследования электромагнитных свойств искусственных нанокompозитов. Методы измерения, применяемые для естественных сред, не всегда могут быть автоматически перенесены на композиты, т. к. их материальные параметры могут варьироваться в широких пределах. Нами разработаны физические методы измерения и экспериментального исследования электрофизических параметров искусственных нанокompозитных сред в сверхвысокочастотном (СВЧ) диапазоне длин волн.

Для проведения экспериментов была создана схема (рис. 11). В нее включены вентили 2 для обеспечения развязки между различными элементами измерительной схемы (при этом обеспечен уровень переотражений < 0.2 дБ). Атенюаторы 3 включены для обеспечения стабильного уровня мощности (при этом обеспечено $7.0 \text{ мкВт} \pm 10 \text{ мкВ}$). В качестве задающего генератора 1 использован генератор на диоде Ганна (частотная стабильность 10^{-6} , достигнута использованием внешнего стабилизирующего гофрированного резонатора [25, 26] с $Q \cong 10^5$).

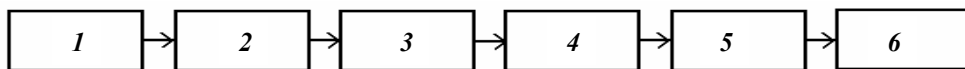


Рис. 11. Структурная схема измерения параметров нанокompозитных образцов:
1 – генератор Ганна, 2 – вентиль, 3 – аттенюатор, 4 – волновод, 5 – волноводная вставка,
6 – измеритель мощности

Методика измерений основывалась на использовании схемы замещения [24]. В качестве первого этапа производилось измерение прошедшей мощности P_0 при отсутствии образца. Затем измерялись величины P при наличии образца. Величина ослабления определялась по формуле

$$N = \lg\left(\frac{P_0}{P}\right). \quad (21)$$

При измерении порошковых образцов использовалась волноводная вставка. Вставка представляла собой отрезок стандартного волновода сечением 23×10 мм, длиной 4 мм. Входное и выходное сечения закрывались плоскими слоями фторопласта толщиной 0.1 мм. Выбор фторопласта в качестве материала обусловлен его малыми потерями (ослабление $\leq 0.1 \div 0.2$ дБ). Порошок помещался внутрь вставки и уплотнялся. Уплотнение необходимо для исключения погрешностей, связанных с флуктуациями плотности материала внутри образца и при переходе от одного образца к другому.

Для контроля точности измерений производились повторные измерения при различных ориентациях вставок относительно поперечного сечения волновода.

Углеродные нанотрубки получали по методике, аналогичной описанной в работе [27], углеродные нановолокна – [28]. Нанотрубки получали на катализаторе, содержащем 5 мас. % Co+Mo (1:3), при 940 °С. Первичные продукты отмывали от основной массы катализатора и сушили. Зольность определяли гравиметрическим методом с отжигом на воздухе при 850 °С. Точную величину зольности исследованной партии нанотрубок определить не удалось, однако по аналогии с другими партиями можно говорить, что она находится в пределах 6–8 мас. %. Некоторые свойства продуктов описаны в [29]. Результаты экспериментальных исследований углеродных нанотрубок и нановолокон приведены в табл. 3.

Таблица 3

Величина ослабления углеродных нанотрубок и углеродных нановолокон (РХТУ им. Д. И. Менделеева)

Частота, ГГц	Ослабление: углеродные нанотрубки (...Co-Mo- 5 мг)	Ослабление: углеродные нановолокна диаметр 30–60 нм, зольность 1.46–1.48 %, содержат никель
8.15	43.1	41.0
10.0	44.2	45.5
12.42	42.8	43.2

Как показывают измерения, представленные для экспериментального исследования образцы, имеют перспективы применения для создания миниатюрных неперестраиваемых фильтров для следящих приемников, используемых как пре- и постселекторы, а также при создании частотно-селективных ограничителей мощности, согласованных нагрузок. Основная перспектива применения дешевых углеродных нановолокон – широкополосные радиопоглощающие материалы.

3. Микроволновые технологии

С 1994 г. в НИИ ЯП ведутся исследования в области применения микроволновой энергии для сушки и стерилизации различных продуктов и материалов (древесина, грунт, минеральные субстраты, пищевые продукты, керамика и др.). К настоящему времени достоверно установлена высокая эффективность и экономичность технологий микроволновой сушки и стерилизации. Воздействие электромагнитных волн оказывает избирательное воздействие на патогенные микроорганизмы. Практическим приложением результатов этих исследований явилась разработка оборудования для сушки и стерилизации различных материалов [30, 31, 44]. Эффективность микроволновой стерилизации и сушки подтверждает многолетний начиная с 1996 г. опыт ее применения на предприятиях Республики Беларусь [32–43].

В 2006 г. микроволновая технология стерилизации диэлектрических материалов была награждена дипломом и серебряной медалью на VI Московском международном салоне инноваций и инвестиций.

4. Технология предпосевной биофизической обработки семян льна

Разработанная микроволновая технология предпосевной обработки семян льна – экологически безопасная биотехнология, в основе которой лежит информационное (частотное) воздействие микроволновой энергии малого уровня мощности на биологические объекты.

Это воздействие повышает энергию прорастания и иммунитет растений. Применение данной технологии позволяет уничтожить семенную инфекцию, повысить энергию прорастания семян, усиливает развитие корневой системы, увеличивает фотосинтезирующий аппарат растений, способствует более быстрому развитию растений и более раннему плодоношению.

Применяется при выращивании льна в качестве приема предпосевной активации семенного материала.

Разработка (см. табл. 4) прошла полевые испытания в следующих хозяйствах Республики Беларусь: ОАО «Поставский льнозавод», ОАО «Березинский льнозавод», ОАО «Пуховичлен», Слуцкая льносемястанция, Ляховичская льносемястанция.

Таблица 4

Основные технические характеристики оборудования

Наименование	РКЭС 1
Производительность, т/сутки	1–1,2
Потребляемая мощность, кВтч	1,8
Количество источников эм энергии, шт.	5
Ресурс источника эм энергии, лет	5
Габариты, м (уточняются)	1,5×1,5×3
Вес, кг (уточняется)	1200
Гарантия, мес.	24
Срок службы оборудования не менее, лет.	8



Рис. 12 . РКЭС 1

Степень готовности – оборудование готово к внедрению в массовое производство (см. рис. 12).

5. Полученные результаты

Были проведены полевые исследования влияния микроволновой обработки на рост и развитие льна-долгунца на примере трех сортов (двух среднеспелых «Е-68» и «Нива», и одного позднеспелого «Василек»), в пяти льносеющих хозяйствах Республики Беларусь. Получены следующие результаты.

1. Произошло повышение полевой всхожести за счет активации метаболических процессов у семян льна-долгунца, обработанных перед посевом микроволнами (табл. 5).

Таблица 5

Влияние микроволновой обработки на полевую всхожесть

Вариант опыта	Полевая всхожесть, %			
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»
3-й режим	76	—	—	—
2-й режим	74	60	83	75
Контроль	66	54	66	72
Протравитель	63	47	65	66

Примечание. «Ляховичи»: протравитель + микроволны – 72 %;
протравитель – 66 %.

2. В процессе вегетации отмечено наличие у варианта с микроволновой обработкой более мощной корневой системы и сокращение сроков прохождения фаз развития за счет лучшего обеспечения пластическими материалами, необходимых для растения.

3. Важным результатом эксперимента можно считать, что на обработанных участках не было отмечено наличия заболеваний.

4. Положительно сказалась микроволновая обработка на росте растений. Произошла активация микроволнами ферментов и уридифосфатглюкозы, которые участвуют в образовании волокон льна, в результате чего в варианте с микроволнами растения были выше, чем в других вариантах (табл. 6).

Таблица 6

Общая высота растений на экспериментальных участках

Вариант опыта	Общая высота растений, см				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	82.8	—	—	—	—
2-й режим	78.0	98.9	90.4	97.8	—
Контроль	73.7	95.8	85.7	94.6	—
Протравитель	71.7	87.1	84.7	80.5	78.8
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	90.9

Интенсивный рост всегда коррелирует с большим накоплением сухих веществ. Их накопление непосредственно связано с деятельностью фотосинтетического аппарата растения. Соответственно вариант с микроволнами имеет более высокую фотосинтетическую интенсивность, что отчетливо видно из табл. 7.

Таблица 7

Содержание сухого вещества фаза «елочка» (интенсивный рост)

Вариант опыта	Содержание сухого вещества, %
Режим	47
Протравитель	26
Контроль	20

5. Было установлено, что растения льна-долгунца, семена которых были обработаны перед посевом микроволнами, имели также большую ассимилирующую поверхность по сравнению с другими вариантами опытов и содержали больше хлорофилла. За счет этого увеличился экспорт ассимилянтов из листьев в стебель, что проявилось в более насыщенной окраске и способствовало формированию более сильного и мощного растения.

6. Необходимо отметить такой важный фактор, как сохранность растений к уборке, в этом случае также отмечено положительное влияние микроволновой обработки (табл. 8).

Сохранность растений на момент уборки

Вариант опыта	Количество растений к уборке, шт.				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	1572	–	–	–	–
2-й режим	1568	912	1016	960	–
Контроль	892	856	776	792	–
Протравитель	1024	876	728	888	784
2-й режим + протравитель	–	–	–	–	896

7. Сохранность растений повлияла на продолжительность фотопериода, посе́вы оказались более густыми в тех вариантах опыта, где семена были обработаны микроволнами, и как следствие, растения более тонкие и вытянутые, а из длинных стеблей в процессе первичной обработки получают, как правило, длинное волокно. Все эти факторы помогают решить главную задачу льноводов, которая состоит в том, чтобы вырастить высокий, в меру тонкий и выровненный стеблестой.

8. Итогом всего растениеводческого производства является урожай и его качество.

а) Значительные результаты получены по урожайности семян на участках, обработанных микроволнами. В варианте с микроволнами прибавка по отношению к контролю на различных участках составила от 7 до 26 %, а по отношению к традиционной обработке протравителем от 13 до 44 % (табл. 9).

Таблица 9

Урожайность семян льна-долгунца, полученная при проведении полевых экспериментов

Вариант опыта	Урожайность семян, ц/га				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	7.3	–	–	–	–
2-й режим	8.3	10.4	10.0	12.0	–
Контроль	6.4	7.7	7.8	11.2	–
Протравитель	5.6	5.8	5.8	7.9	4.6
2-й режим + протравитель	–	–	–	–	5.3

б) Влияние микроволн на качество урожая выражалось в качественном воздействии на ультраструктуру волокон, которое заключалось в увеличении наличия полисахаридов клеточной стенки и за счет этого увеличилось число лубяных пучков на отдельных экспериментальных участках (табл. 10).

Выход луба

Вариант опыта	Выход луба, %				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	31	—	—	—	—
2-й режим	29	32	19	27	—
Контроль	28	34	12	28	—
Протравитель	30	31	15	26	28
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	25

Номер льнотресты определяется в лабораториях льнозаводов по общепринятой методике. Результаты исследований приведены в табл. 11.

Таблица 11

Результаты определения номера льнотресты

Вариант опыта	Номер льнотресты				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	0.50	—	—	—	—
2-й режим	0.50	1.25	1.0	1.50	—
Контроль	0.50	1.25	0.50	0.50	—
Протравитель	0.50	1.25	0.75	0.75	0.75
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	1.00

Полученные данные дают основание сделать вывод, что необходимо постепенно отходить от традиционной и экологически небезопасной предпосевной обработки с использованием протравителя и широко применять обработку микроволнами, дающую положительные результаты по различным аспектам.

6. Оборудование для стерилизации почвенных субстратов с помощью электромагнитной энергии

Назначение: обеззараживание грунтов электромагнитным полем сверхвысокой частоты (СВЧ) (см. рис. 13).

Рекомендуемая область применения: стерилизация грунтов (уничтожение вредных насекомых, бактериальных и грибных патогенов, семян сорняков).

Преимущества перед известными аналогами: более высокий бактерицидный эффект, экологическая чистота, энергосбережение, отказ от пропаривания и применения хлорсодержащих препаратов.



Рис. 13. Оборудование для стерилизации почвенных субстратов полем сверхвысокой частоты

Результаты испытаний: результаты испытаний приведены в таблицах «Показатели эффективности микроволновой стерилизации».

Технико-экономический эффект: сравнение различных способов обработки грунтов показывает, что наименьшие удельные затраты энергии имеют место при СВЧ-обработке – $< 20 \text{ кВт ч/м}^3$, при обработке электрическим током $> 40 \text{ кВт ч/м}^3$, при обработке паром $> 70 \text{ кВт ч/м}^3$. Чем выше начальная влажность грунта, тем больше это преимущество.

Сведения об изобретении: установка обладает патентоспособностью (возможность патентования на территории России и других стран).

Обоснование применения электромагнитной энергии СВЧ:

Болезни растений могут быть вызваны вредными насекомыми, различными бактериями, вирусами и грибами, которые содержит почва. Грибы и бактерии вызывают гнилостные заболевания, а вирусы – мозаичный рисунок на листьях. Стерилизация почвы помогает избавиться от большей части почвообитающих организмов.

Основные болезни растений, которые могут вызываться патогенами, содержащимися в грунте:

Бурая пятнистость листьев, кладоспориоз. Возбудитель заболевания – гриб *Cladosporium fulvum* Cooke. Заболевание относится к числу распространенных и вредоносных в защищенном грунте. Кладоспориоз встречается в основном на листьях, но при эпифитотийном проявлении болезни признаки ее можно обнаружить на черешках, плодоножках, завязи. Первые признаки поражения проявляются на нижней стороне нижних листьев в виде светло-зеленых, а затем темно-бурых пятен с одинаковым налетом гриба. Позже на верхней стороне листьев образуются светло-зеленые, впоследствии желтеющие, бурые пятна округлой или неправильной формы. Источниками первичной инфекции являются

ся зараженные растительные остатки, а также споры гриба в почве, на оконных стеклах и поверхности культивационных сооружений. Семенами гриб не передается.

Стеблевая гниль. Это заболевание впервые было отмечено в 1990 г. Возбудитель – гриб *Didymilla lycopersici*. Болезнь проявляется в виде увядания, очень вредоносна. В нижней части стебля образуются бурые и черные пятна с мелкими пикнидами. На листьях иногда видны некротические пятна, окруженные желтым ободком. Темные углубляющиеся пятна появляются на плодах. Паразит зимует на пораженных и отмирающих остатках растений в виде аскоспор в почве, которые являются источником первичной инфекции.

Серая гниль. Возбудитель – гриб *Botrytis cinerea* Pers. Заболевание сильно поражает плоды и междоузлия стебля, особенно в пленочных теплицах, если в это время стоит прохладная, пасмурная погода. На зеленых или созревающих плодах появляются светло-зеленые, сначала мелкие, затем увеличивающиеся пятна, в центре их выделяются бурые точки. На этой стадии пятна выглядят водянистыми, впоследствии ткань загнивает. Зимует возбудитель серой гнили в виде склеротий, в тепличном грунте образует конидии – на внутренней поверхности стекол.

Бактериальный рак. Возбудитель – бактерия *Corynebacterium michiganense* jensen. На черешках и стеблях больных растений появляются бурые полосы при продольном срезе. На плодах пятна мелкие, желтоватые или почти белые с центром. Пораженные плоды часто бывают неправильной формы, мякоть в отдельных местах бурая, плоды опадают.

Аскохитоз. Возбудитель – гриб *Ascochyta melonis* Pot. cucumis Fautr. et Roum. Поражает чаще всего листья и стебли. Листья покрываются крупными округлыми, ярко-желтыми или светлыми хлоротичными пятнами. На стеблях и междоузлиях места поражения становятся сухими, серыми и ткань покрывается множеством черных точек спороношения гриба. Одним из источников инфекции аскохитоза являются зараженные растительные остатки в почве.

Фузариоз. Поражение растений этой болезнью происходит в различные фазы роста и развития, начиная с фазы всходов, иногда даже проростков. Большинство высаженных на постоянное место растений, пораженных корневой гнилью, внешне до цветения почти не отличаются от здоровых. Со времени вступления в фазу плодоношения начинается их увядание. Первый признак заболевания взрослых растений – поникание верхушек в яркие полуденные часы. Главный корень больных растений постепенно буреет или полностью отмирает. Боковые корешки также частично или полностью отмирают. Основным источником заражения огурца фузариозом – почва, куда гриб попадает с растительными остатками. Возбудитель передается семенами.

Белая гниль. Возбудитель – гриб *Sclerotinia cinerea* Pers. Vu. Болезнь может развиваться на всех частях растений – корнях, стеблях, черешках, листьях и плодах. При поражении наземных органов ткань становится мягкой, слегка ослизняется, покрывается плотной грибницей, в которой впоследствии образуются черные склеротии. Растения увядают, листья теряют тургор, засыхают. Возбудитель белой гнили передается по воздуху, а также переносится механически (на руках и инструментах). Заражение происходит почти всегда через ранки.

Мучнистая роса. На листьях образуется белый или сероватый налет, сначала в виде отдельных пятен, а затем вся пораженная поверхность покрывается налетом. Листья буреют и засыхают. Возбудители мучнистой росы зимуют в виде сумчатой стадии на остатках пораженных растений в почве.

7. Основные вредители овощных культур

Обыкновенный паутинный клещ. Это многоядный вредитель, особенно вредоносен для культуры огурца. Самка клеща широкоовальной формы, длиной 0.4–0.5 мм. Самка летних поколений – серовато-зеленого цвета с темными пятнами по бокам, зимующие самки оранжево-красные. Самцы более удлиненные, несколько меньше самок. Взрослые особи имеют четыре пары ног. Яйца мелкие, шаровидной формы, зеленовато-желтые, полупрозрачные. Личинки полушаровидной формы, длиной 0.12–0.13 мм, с тремя парами ног. Самка откладывает яйца вразброс на нижней стороне листа. Одна самка в течение периода жизни (2–3 недели) способна отложить до 150 яиц и более. В течение года паутинный клещ способен давать до 20 поколений. Первым внешним признаком повреждения является появление отдельных светлых пятен. При продолжительном питании вредителя пятна постепенно сливаются, листья желтеют и отмирают. Зимуют оплодотворенные самки в щелях теплиц под комочками почвы, сухими остатками растений, в пчелиных семьях.

Тепличная белокрылка. Относится к семейству Алейродид, отряда Равнокрылых хоботных насекомых. Взрослые насекомые имеют бледно-желтое тело длиной 1.5 мм с двумя парами мучнисто-белых крыльев. Самка несколько крупнее самца. Самка откладывает яйца, прикрепляя их к листу при помощи стебелька (ножки). На опушенных листьях яйца располагаются поодиночке, на гладких – группами, часто в виде кольца. Яйца продолговатой формы, сначала белые, затем приобретают темно-коричневый цвет, почти черный. Продолжительность развития яйца зависит от температуры и колеблется от 4 до 7 дней. Существует 4 личиночные стадии. Продолжительность развития белокрылки составляет 28–30 дней, плодовитость – в среднем 240 яиц. За период вегетации растений в теплице белокрылка развивается в 6–8 поколениях.

Табачный трипс. Широко распространенный вид полифага, чаще всего повреждает огурец. У трипса светло-желтая или коричневая окраска, тонкое удлиненное тело, узкие крылья с бахромой из волосков. Крылья и передние ноги желтоватого цвета. Одна самка вредителя откладывает до 100 яиц в ткани листьев растений, по 3–4 яйца в день. Развитие яйца длится 6–7 дней. Развитие личинок проходит на листьях, нимф – в почве. Развитие трипса от яйца до имаго проходит за 20–25 дней. За вегетационный период вредитель дает 6–8 поколений. В местах укусов от личинок и имаго трипсов на листьях образуются светло-желтые пятна угловатой формы. При сильном повреждении весь лист имеет беловато-желтые крапинки с черными точками – экскрементами трипсов. Листья становятся бурыми и засыхают. Для развития трипса оптимальная температура воздуха – 25–30 °С. В теплицах вредитель сохраняется на проростках сорняков.

Огуречный комарик. Взрослые комарики – мелкие, темно-серые, двукрылые насекомые, реже бескрылые (самки). Голова маленькая, полушаровидная, опущенная вниз. Яйца откладывают в почву или в трещины стебля огурца кучками по 20–80 штук. Яйца белые, овальные, блестящие. Продолжительность фазы яиц 5–10 дней. Развитие личинок длится 8 дней. Личинки беловатые, полупрозрачные, с просвечивающимся темным кишечником и с черной головой. Продолжительность личиночной фазы – 8–12 дней. Окукливаются личинки в почве, длительность фазы куколки – 7–8 дней. Весь цикл развивается при температуре 18–20 °С, длится 24–30 дней, в теплицах комарики могут давать до 8 поколений в год. Вредят личинки комариков, внедряясь в корень. Они проделывают ходы в корнях и разрушают их. Признаки повреждения растений обнаруживаются не сразу. Повреждения заметны в фазу цветения и плодоношения. Растения теряют тургор, увядают и гибнут.

Пасленовая минирующая муха. Минирующая муха в теплице повреждает в основном помидоры, но часто наносит вред рассаде капусты и листьям огурца. Развитие трипса от яйца до имаго проходит за 20–25 дней. За вегетационный период вредитель дает 6–8 поколений. В местах укулов от личинок и имаго трипсов на листьях образуются светло-желтые пятна несколько угловатой формы. При сильном повреждении весь лист имеет беловато-желтые крапинки с черными точками – экскрементами трипсов. Листья становятся бурыми и засыхают. Для развития трипса оптимальная температура воздуха – 25–30 °С. В теплицах вредитель сохраняется на проростках сорняков.

Нематоды. Большую угрозу для огурца и томата представляют нематоды. Чаще встречаемыми видами галловых нематод являются: южная, песчаная и северная.

Южная галловая нематода распространена главным образом в защищенном грунте, опасный паразит огурца и томата. Нематода проникает в растение в точке роста корня. Поселяется в тканях корней, где, выделяя токсические вещества, вызывает образование галлообразных вздутий. Внутри галлов, где были отложены яйца, происходит развитие личинок. Личинки живут во вздутии корней или выходят в почву и переходят на другие растения. Растение, поврежденное галловой нематодой, отстает в росте и значительно снижает урожай. Галлообразование на корнях затрудняет водоснабжение и нарушает нормальное питание растений, поэтому вред от нематод особенно велик в жаркую погоду. На одном растении может быть до несколько сот галлов. Галлы бывают величиной от булавочной головки до 3–5 мм в диаметре. Галловая нематода теплолюбива. Развивается при температуре 25 °С в течение 21 дня, а при 17 °С – 40 дней. Для уничтожения в тепличном грунте вредных насекомых, микроорганизмов и семян сорняков применяют обычно обработки ядохимикатами или паром. Главный недостаток химического способа – в опасности накопления в грунте ядовитых веществ, термического – в большой трудоемкости (например, при «шатровом» способе обработки паром требуется 10 чел.-дн. на каждую тыс. кв. м). Сложность борьбы с вредоносными и распространенными вредителями и болезнями овощных культур заключается в видовом многообразии вредителей, исключительно высоких темпах размножения, высокой плодовитости. Многие

вредители, закончив питание (особенно трипсы) переселяются в почву, где превращаются в прониимфу и нимфу.

Разработанная нами технология основывается на стерилизующем эффекте СВЧ электромагнитных колебаний. Эффект заключается в избирательном нагреве патогенных микроорганизмов, являющихся влажными диэлектриками. Возбудители болезней при СВЧ воздействии погибают вследствие высокой скорости нарастания их температуры. За 1 секунду температура микроорганизма повышается на 5–7 градусов (при этом нагрев идет внутри организма). Регулируя время воздействия и интенсивность электромагнитного излучения, получили полную стерилизацию почвы или почвенных субстратов.

Основные технические характеристики оборудования для стерилизации грунта

1. Производительность, т/сут.....1–2
2. Потребляемая мощность, кВтч.....8–9
3. Количество микроволновых модулей, шт.....6
4. Рабочая частота источника э/м энергии, МГц.....2450 ± 100
5. Вес, кг.....1800

Результаты производственных испытаний оборудования для микроволновой стерилизации грунта (см. рис. 13) – положительные. Процент ингибирования возбудителей болезней растений составил 100 %. Жизнеспособных галловых нематод в различных стадиях развития после обработки почвы не обнаружено. Это дает основание утверждать о высокой эффективности метода микроволновой стерилизации почвы (см. табл. 12 – 17).

Показатели эффективности микроволновой стерилизации

Таблица 12

Возбудители	Интенсивность спороношения до обработки, %	Интенсивность спороношения после обработки, %	Ингибирование возбудителей, %
<i>Fusarium oxysporum</i> (корневая гниль)	92.8	0	100 %
<i>Botritis cinera</i> (серая гниль)	94.9	0	100 %
<i>Sclerotinia sclerotinian</i> (белая гниль)	85.4	0	100 %
<i>Corinebacterium michiganense</i> (бактериальный рак)	76.3	2.1	97.1 %

Таблица 13

Стадии развития	Количество жизнеспособных нематод в 0.1 мл почвенной вытяжки до обработки	Количество жизнеспособных нематод в 0.1 мл почвенной вытяжки после обработки
Личинка	6.2	0
Самки	7.0	0
Самцы	7.2	0

Таблица 14

Возбудители до обработки	Возбудители после обработки
Споры <i>Ascohyta cuscumeris</i> – 17–18 шт.	Обрывки мицелия
Споры сапрофитных грибов – массовое количество	Обрывки мицелия
Споры <i>Colletotrichum</i> – массовое количество	Обрывки мицелия
Споры <i>Botritis cinerea</i> – массовое количество	Обрывки мицелия

Таблица 15

Возбудители	Наличие жизнеспособных колоний патогена
<i>Colletotrichum</i>	0
<i>Aspergillus</i> , <i>Ascochita</i> , <i>Penicillium</i>	0
<i>Mucor</i>	единичные
<i>Fusarium</i>	0

Таблица 16

Возбудитель	Наличие колоний после облучения живых	Наличие колоний после облучения погибших	Ингибирование возбудителей, %
<i>Ascochita</i>	0	10	100
<i>Colletotrichum</i>	0	20	100
<i>Fusarium</i>	0	0	–
<i>Botrytis</i>	0	16	100
<i>Aspergillus</i>	0	22	100
<i>Mucor</i>	0	40	100



Рис. 14. Оборудование для микроволновой стерилизации пищевых добавок

8. Оборудование для микроволновой стерилизации пищевых добавок

Оборудование предназначено для высокоэффективной энергосберегающей технологии стерилизации продуктов, а также материалов для различных отраслей промышленности и сельского хозяйства на конвейере, в основе которой лежит высокое поглощение микроволновой энергии диэлектрическими материалами и отсутствие промежуточных носителей. На рис. 14 приведена фотография оборудования для стерилизации пищевых добавок из шрота расторопши «Здравушка».

Таблица 17

Результаты исследования режимов микроволновой стерилизации препаратов расторопши «Здравушка» по микробиологическим показателям

Показатели	Нормативы	Режимы стерилизации					
		1	2	3	4	5	К
1. КМАФАн М/ког/г/	Не более 1×10^4	2.8×10^2	1.3×10^2	6×10^2	3.2×10^2	Избыточная мощность.	8×10^5
2. БГКП	Не доп. в 0.1 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
3. E. coli	Не доп. в 1 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
4. St. aureus	Не более 200	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
5. B. cereus	Не доп. в 10 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
6. Патогенные в т. ч. сальмонелла	Не более 100		Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
7. Дрожжи /ког/г/	Не более 100	1.2×10^4					
8. Плесени /ког/г/			Не обн.	Не обн.	Не обн.		6×10^4

Технические характеристики оборудования

1. Оборудование выполняет микроволновую стерилизацию препаратов расторопши «Здравушка» в виде шрота, таблеток и капсул.
2. Производительность.....1–2 т/сутки.
3. Рабочая частота источника эм энергии, МГц.... 2450 ± 100 .
4. Питание оборудования – трехфазная сеть переменного тока напряжением 380 В, частотой 50 Гц.
5. Потребляемая мощность.....8 кВтч.
6. Габариты..... $4 \times 2.5 \times 1.5$ м.
7. Вес.....1300 кг.
8. Загрузка/выгрузка препаратов, фасованных в любую (не металлическую тару) ручная.
9. Гарантия.....12 мес.
10. Срок службы оборудования.....8 лет.

Оборудование должно располагаться в помещении, защищенном от попадания атмосферных осадков, предназначено для эксплуатации в условиях умеренного климата исполнения УЗ.1 по ГОСТ 15150-69.

9. Заключение

Предложены новые принципы широкополосного согласования высокودобротных резонансных систем с одномодовыми волноводами при помощи плавных волноводных переходов, обеспечивающих $KCB < 1.88$ и нагруженную добротность > 40000 волноводами в диапазоне частот 53–178 ГГц.

Проведено теоретическое и экспериментальное исследование новых принципов широкополосного согласования высокودобротных широкодиапазонных резонаторов с одномодовыми волноводами при помощи плоских щелевых решеток.

В результате спроектированы новые устройства связи, которые обеспечили $KCB < 1.6$ во всем диапазоне перестройки резонатора.

Данные устройства связи альтернативны бездиафрагменным устройствам связи, т. к. в миллиметровом диапазоне частот сужающиеся волноводы обычно изготавливают методом гальванического наращивания, что требует изготовления сверхточных оправок и является дорогостоящим технологическим процессом. Новые решетчатые устройства связи выполнены средствами микроэлектроники в виде интегральной схемы, что обусловило их высокую надежность и повторяемость результатов. Существенно, что они не требуют подгонки величины связи как в процессе производства, так и в процессе эксплуатации резонатора (при его частотной перестройке).

Особо следует отметить, что применение новых устройств связи в резонаторах практически не ухудшило нагруженную добротность резонатора.

Разработано стендовое оборудование и методики измерения электродинамических параметров нанокompозитных материалов.

Выполнен анализ электромагнитных задач для составных материалов. Разработана электродинамическая модель теплового взаимодействия СВЧ энергии с различными диэлектрическими материалами. Разработана математическая модель электродинамических и энергетических процессов функционирования микроволнового теплового модуля с рупорной конструкцией возбуждения и учетом диэлектрической нагрузки.

Сформулирована математическая постановка задачи для самосогласованной системы уравнений Максвелла и уравнения теплопроводности, связанных через комплексную диэлектрическую проницаемость нагреваемого материала.

Получены распределения возбуждаемых электромагнитных полей в объеме камеры и в диэлектрическом заполнении, а также характерные зависимости от σ и ϵ_r коэффициента поглощения диэлектриком, которые подаются в СВЧ-камеру через рупор.

Расположение открытых технологических окон конвейерной камеры СВЧ-нагрева выбраны таким образом, чтобы обеспечить защиту от паразитного излучения. Во всех разработанных образцах технологического оборудования для сушки и стерилизации различных диэлектрических материалов обеспечена равномерность нагрева.

Модульный принцип построения технологического оборудования позволил выполнять различные хозяйственные проекты по стерилизации, нагреву и сушке диэлектрических материалов в кратчайшие сроки.

Разработано высокоэффективное оборудование для микроволновой стерилизации почвы, сушки и стерилизации пищевых и биологически активных добавок. Разработано промышленное оборудование для биофизической микроволновой предпосевной обработки семян льна.

Литература

1. *Faby G., Schiinemann K.* // IEEE Trans. on MTT. 1997. Vol. 45. P. 2043.
2. *Matsui T., Akari K., Kijokawa M.* // IEEE Trans. on microwave theory and techniques. 2000. Vol. 48. P. 1043.
3. Булгаков Б. М., Гламаздин В. В., Натаров М. П., Скресанов В. Н. // РЭ. 1998. Т. 3. С. 46.
4. Леонов Ю. И., Фурсов А. М. // Радиотехника. 1986. Вып. 59. С. 22.
5. Балаклицкий И. М., Ревин И. Д. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 1983. Т. 26. С. 235.
6. *Kuraev A. A., Natarov M. P., Rodionova V. N.* et al. // Int. J. Electronics. 1991. Vol. 70. P. 1005.
7. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // РЭ. 1989. Т. 34. С. 1357.
8. *Rodionova V. N., Slepyan A. Ya., Slepyan G. Ya.* // Electronics Letters. 1991. Vol. 27. P. 1427.
9. Кисунько Г. В. Электроника помех систем. 1949.
10. Вайнштейн Л. А. Теория дифракции и факторизации. 1966.
11. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // РЭ. 1986. Т. 31. С. 1915.
12. Конторович М. И., Астрахан М. И. и др. Электродинамика сетчатых структур. 1987.
13. Нефедов Е. И., Сивов А. Н. Электродинамика периодических структур. 1977.
14. Альтман Д. Устройства сверхвысоких частот. 1969.
15. *Ilyinsky A. S., Kuraev A. A.* et al. // Proc. of the URSI Int. Symposium of electromagnetic theory. Stockholm. 1989. P. 64.
16. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // ЖТФ. 1989. Т. 59. С. 7.
17. *Ilyinsky A. S., Slepyan G. Ya., Slepyan A. Ya.* Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
18. Шестопалов В. П., Кириленко А. А., Масалов С. А. Матричные уравнения типа свертки в теории дифракции. 1984.
19. Свешников А. Г., Ильинский А. С. // Вычисл. математика и мат. физика. 1968. Т. 8. С. 363.
20. Велиев Э. В., Веремей В. В., Шестопалов В. П. // РЭ. 1988. Т. 33. С. 478.
21. Левин М. Л. // Техническая физика. 1948. Т. 18. С. 653.
22. *Lyarin V. P., Michalevsky V. S., Sinyavsky G. P.* // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1982. Vol. 30. P. 1107.
23. Альтман Д. Устройства сверхвысоких частот. 1969.
24. *Altman Dj.* Microwave devices. 1970.
25. *Ilinsky A. S., Slepyan G. Ya., Slepyan A. Ya.* Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
26. *Karpovich V. A., Rodionova V. N., Slepyan G. Ya.* // Electromagnetics. № 11, 2004.
27. Раков Э. Г., Блинов С. Н. и др. // Ж. прикл. химии, 2004. Т. 77. С. 193.
28. Раков Э. Г., Гришин Д. А. и др. // Ж. физ. химии. 2004. Т. 78. № 12. С. 2204.
29. Золотухин И. В., Голев И. М. и др. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. С. 54.
30. Карпович В. А., Родионова В. Н., Притула И. В. Патент РБ №5107 от 30.03.99, F 26B 3/347. Микроволновое устройство. Выд. 23.12.2002.
31. Карпович В. А., Родионова В. Н., Притула И. В. Патент РБ №5274 от 30.03.1999, F 26B 3/347. Устройство для СВЧ нагрева. Выд. 03.03.2003.
32. *Rodionova V. N., Karpovich V. A., Slepyan G. Ya.* // The Fourth Int. Kharkov Symposium "Physics and engineering of millimeter and sub-millimeter waves". 2001. P. 909.

33. *Karpovich V. A., Rodionova V. N., Slepyan G. Ya.* // Telecommunications and Radio Engineering. 2002. Vol. 57(2–3). P. 168.
34. *Rodionova V., Karpovich V.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 601.
35. *Ермолович А. А., Карпович В. А.* и др. // Миллиметровые волны в биологии и медицине. 2004. №1. С. 68.
36. *Ермолович А. А., Карпович В. А.* и др. // Гавриш. 2004. № 3. С. 36.
37. *Карпович В. А., Ермолович А. А.* и др. // Агропанорама. 2004. № 4. С.17.
38. *Vas'ko P., Ermolovich A.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 832.
39. *Ermolovich A., Karpovich V.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 874.
40. *Карпович В., Ермолович А.* // Радиомир. 2004. № 9. С. 21.
41. *Карпович В., Сидоров Е.* // Радиомир. 2004. № 11. С. 19.
42. *Karpovich V. A.* // Доклад на днях науки Республики Беларусь, Китай, Чанг-Чунь, июнь 2005 г.
43. *Карпович В. А., Ермолович А. А.* // 2 Международная конференция «Состояние и проблемы научного обеспечения овощеводства защищенного грунта». 2005. Москва.
44. *Карпович В. А., Родионова В. Н.* Патент РБ № 5580. Способ предпосевной обработки семян овощных или зерновых культур. Выд. 23.06.2003.

ELECTRODYNAMICS OF SPECIAL HIGH-QUALITY RESONANCE SYSTEMS AND MICROWAVE TECHNOLOGIES

**V. A. Karpovich, G. Ya. Slepyan, V. N. Rodionova, G. I. Volinets,
A. A. Savuk, O. V. Tanana, I. A. Grinchuk**

Resonance systems are widely spread in modern radiotechniques for frequent filtration of electromagnetic oscillations, realization of feedback by its strengthening and generation. Resonance effect and resonance systems are widely spread when measuring material environment's characteristics, for creation of different industrial plants and equipment, which is based on principle of savings electromagnetic energy in resonance volume.

The most relevant problems, arising during theoretical and practical investigating principles of creation of resonance systems in VHF-range are the development of calculation methods of broadband elements of connection of resonance systems with single-mode waveguides and technical supplement of received results for development of plants for measuring of electrodynamics characteristics of composite materials in VHF-range and also high-quality equipment for microwave heating, sterilization, drying of different dielectric materials.

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ НА ПРОЦЕСС ИЗЛУЧЕНИЯ В СИСТЕМЕ «ВЗРЫВОМАГНИТНЫЙ ГЕНЕРАТОР – ЕМКОСТНАЯ НАГРУЗКА»

В. Г. Барышевский, А. А. Гуринович

Включение взрывомагнитного генератора (ВМГ) в цепь с емкостной нагрузкой вызывает осцилляции в этой цепи, а значит и радиочастотное излучение [3, 4]. Согласно [3], излучение испускается витками индуктора ВМГ, который описывается как спиральная антенна. В настоящем сообщении показано, что емкостная нагрузка также является источником радиационных потерь. Получены уравнения, описывающие процессы в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка» с учетом силы радиационного трения [8]. Эта сила сопровождает процесс излучения благодаря появлению зависящей от времени ЭДС в указанной цепи. Показано, что сила радиационного трения существенно влияет на временные характеристики и мощность радиочастотного излучения в такой цепи.

1. Введение

Взрывомагнитные генераторы (ВМГ) широко используются для получения сверхсильных магнитных полей [1, 2]. ВМГ с емкостной нагрузкой (ВМГЕ) также исследовался в качестве возможного источника радиочастотного излучения. В частности, нагрузка ВМГ малой емкостью (100–1000 пФ) была рассмотрена в работе [3]. Согласно [3], индуктор ВМГ выступает в роли спиральной антенны и служит источником радиационных потерь.

В настоящем сообщении показано, в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка» радиационные потери, вызванные присутствием емкостной нагрузки, могут существенно влиять на процессы в цепи и должны учитываться при описании.

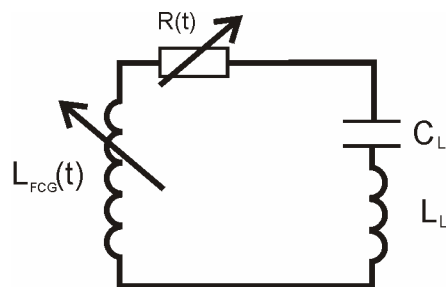


Рис. 1. Эквивалентная схема цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка»

2. Излучение осциллятора

Эквивалентная схема цепи «взрывоманитный генератор – емкостная нагрузка» показана на рис. 1, где L_L и C_L – индуктивность и емкость нагрузки, $L_{FCG}(t)$ – индуктивность ВМГ, а $R(t)$ – полное сопротивление цепи, включающее сопротивление ВМГ и все типы потерь.

Такая цепь описывается уравнением

$$\frac{d}{dt}[L(t)J(t)] + R(t)J(t) + \frac{Q(t)}{C_L} = 0, \quad (1)$$

где $L(t) = L_{FCG}(t) + L_L$ – полная индуктивность цепи, $J(t) = \frac{dQ(t)}{dt}$ – ток в цепи, $Q(t)$ – заряд, $R(t)$ – сопротивление ВМГ и все типы потерь. Согласно [3], потери в ВМГ могут рассматриваться как сумма диффузионных потерь, включающая диффузию сжатого магнитного поля в провода и изоляцию, диссипацию энергии из сжимаемого объема, обусловленную излучением от индуктора ВМГ. Для описания всех типов потерь авторы [3] ввели параметр

$$\beta(\tau) = \frac{R(\tau)}{L(\tau)}\tau_L = \nu + \varepsilon e^{S\tau}, \quad (2)$$

где τ_L – типичное время изменения индуктивности ВМГ, $\tau = t/\tau_L$, $R(\tau)$ сопротивление потерь, описывает диффузионные потери ν , а член $\varepsilon e^{S\tau}$ – диссипативные потери ($\varepsilon = const$, $S = const$).

Уравнение (1) можно представить в виде

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \frac{1}{C_L L(t)} Q(t) = 0 \quad (3)$$

то есть

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{R_{eff}(t)}{L(t)} \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0. \quad (4)$$

Поэтому ВМГЭ эквивалентен осциллятору с частотой $\omega(t) = \frac{1}{\sqrt{C_L L(t)}}$ и

эффективным сопротивлением

$$R_{eff}(t) = \frac{dL(t)}{dt} + R(t).$$

Хорошо известно, что меняющиеся во времени заряды и токи являются источником электромагнитного излучения. Сопровождающая процесс излучения сила радиационного трения [8] появляется благодаря возникновению в цепи зависящей от времени электродвижущей силы. Эта сила вызывает затухание колебаний.

Для описания влияния силы радиационного трения на излучение системы, когда типичная длина волны излучения меньше или сравнима с размерами сис-

темы, нужно использовать самосогласованную систему уравнений Максвелла и уравнений движения заряда. Однако для описания излучения системы с длиной волны больше, чем размеры системы, следует использовать мультипольное разложение излучения [8, 5]. Поэтому длинноволновое излучение системы можно описать суммой электрического дипольного, магнитного дипольного и электрического квадрупольного излучения [8, 5].

Характерные значения емкости в этом эксперименте $C_L = 10^{-8} - 10^{-10}$ Ф. Индуктивность изменяется от $L_0 = 10^{-5} - 10^{-3}$ Гн в начальный момент времени до $L_{fin} = 10^{-7}$ Гн [3]. Поэтому характерные длины волн излучения $\lambda = 2\pi c \sqrt{LC_L} = 60 - 6000$ м многократно превосходят размеры системы и радиационные потери следует описывать на основе мультипольного разложения. Итак, рассмотрим дипольное электрическое излучение, источником которого является емкость, и дипольное магнитное излучение, источником которого является индуктор ВМГ.

3. Потери на излучение за счет дипольного электрического излучения

Рассмотрим, как дипольное электрическое излучение, источником которого в основном является конденсатор, влияет на работу ВМГЕ. Согласно [5], мощность излучения электрического диполя определяется выражением

$$P_d = \frac{\mu_0}{6\pi c} \left(\frac{d^2}{dt^2} d(t) \right)^2, \quad (5)$$

где c – скорость света, $d(t)$ – электрический дипольный момент, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м. Излучение электромагнитных волн диполем приводит к появлению самодействия электрического поля электрического диполя [5]

$$E_d = \frac{\mu_0}{6\pi c} \frac{d^3}{dt^3} d(t), \quad (6)$$

поэтому благодаря этому самодействию появляется дополнительная электродвижущая сила:

$$U_d = E_d d_d = \frac{\mu_0 d_d^2}{6\pi c} \frac{d^2 J(t)}{dt^2} = \frac{20 d_d^2}{c^2} \frac{d^2 J(t)}{dt^2}, \quad (7)$$

где d_d – длина диполя и использовано выражение $c \cdot \mu_0 = 120\pi$ Гн/с.

4. Потери на излучение за счет дипольного магнитного излучения

Рассмотрим влияние дипольного магнитного излучения от индуктора ВМГ на поведение осциллятора. Мощность излучения магнитного диполя можно записать [5]:

$$P_m = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} \left(\frac{d^2}{dt^2} m(t) \right)^2, \quad (8)$$

где $m(t)$ – дипольный магнитный момент.

Это магнитное излучение индуцирует ЭДС в круговом витке [6]:

$$U_{m1} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} \pi^2 \rho_0^4 \frac{d^4 J(t)}{dt^4} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} S^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4}, \quad (9)$$

где ρ_0 – радиус витка, а S – его площадь. Для индуктора ВМГ, содержащего N последовательно соединенных витков ЭДС может быть записана в виде

$$U_{mN} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} (NS)^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4} = \frac{20}{c^4} (NS)^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4}. \quad (10)$$

Здесь следует учесть, что число витков в индукторе зависит от времени $N = N(t)$.

5. Излучение осциллятора с учетом потерь

Итак, падение напряжения в цепи ВМГЕ складывается из нескольких слагаемых: падение напряжения, вызванное изменением тока $L(t) \frac{dJ(t)}{dt}$, падение напряжения на емкости $\frac{Q(t)}{C_L}$ и обусловленное изменением индуктивности $J(t) \frac{dL(t)}{dt}$, падение напряжения, вызванное диффузионными потерями $R_{dif} J(t)$, а также потерями на дипольное электрическое U_d (7) и магнитное U_{mN} (10) излучения.

В результате уравнение, описывающее осциллятор с учетом затухания, обусловленного потерями на дипольное электрическое и магнитное излучение, можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \frac{20N^2 S^2}{c^4 L(t)} \frac{d^5 Q(t)}{dt^5} + \frac{20d_d^2}{c^2 L(t)} \frac{d^3 Q(t)}{dt^3} + \frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \\ & + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R_{dif}(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Это уравнение содержит производные старше второго порядка. Однако можно показать, что в рассматриваемом случае, когда период колебаний $T = \frac{2\pi}{\omega}$ много меньше характерного времени изменения индуктивности $L(t)$, эти производные можно заменить следующими выражениями:

$$\frac{d^5 Q(t)}{dt^5} = \omega^4(t) \frac{dQ(t)}{dt} \quad \text{и} \quad \frac{d^3 Q(t)}{dt^3} = \omega^2(t) \frac{dQ(t)}{dt}$$

В результате уравнение (11) принимает вид

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R_{dif}(t) + R_d(t) + R_m(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0, \quad (12)$$

$$\text{где } R_d(t) = \frac{20N^2(t)S^2\omega^4(t)}{c^4 L(t)}, \quad R_m(t) = \frac{20d_d^2(t)\omega^2(t)}{c^2 L(t)}, \quad \omega^2(t) = \frac{1}{L(t)C_L}.$$

Следовательно, чтобы описать токи и напряжения в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка», мы должны использовать уравнение для

осциллятора с импедансом в виде, хорошо известном в теории антенн [7], но с зависящими от времени $\omega(t)$, $L(t)$ и $N(t)$.

Эти рассуждения проиллюстрированы на рисунках 2–5. Все кривые получены при следующих параметрах цепи: $L_{FCG}(t=0) = 8 \cdot 10^{-5}$ Гн, $L_{FCG}(t=\tau) = 10^{-7}$ Гн, $\tau = 35$ мкс, $R_{FCG}(t=0) = 0.5$ Ом, $R_{FCG}(t=\tau) = 5 \cdot 10^{-4}$ Ом, $C_L = 10^{-11}$ Ф, $L_L = 2 \cdot 10^{-9}$ Гн.

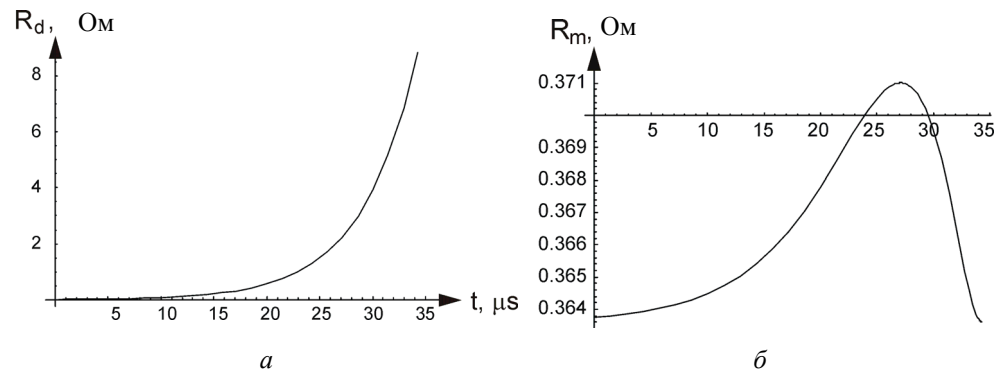


Рис. 2. Сопротивление, описывающее радиационные потери за счет дипольного электрического излучения (а) и дипольного магнитного излучения от индуктора ВМГ (б)

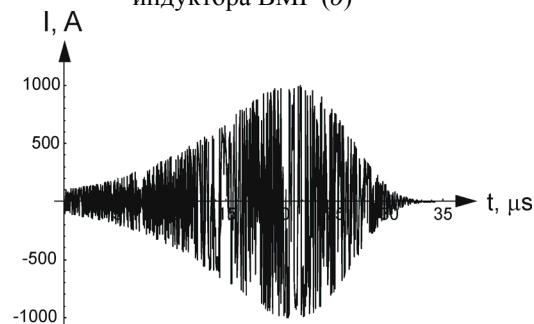


Рис. 3. Ток в цепи ВМГЕ без учета радиационных потерь за счет дипольного электрического излучения, но с учетом магнитных потерь

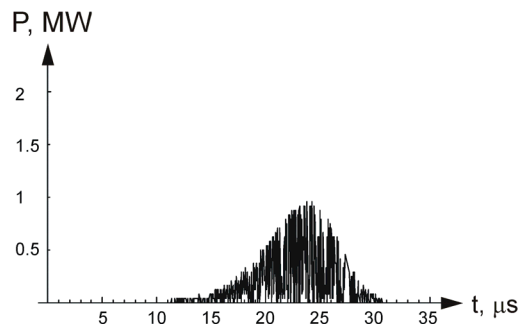


Рис. 4. Мощность излучения ВМГЕ без учета радиационных потерь за счет дипольного электрического излучения, но с учетом магнитных потерь

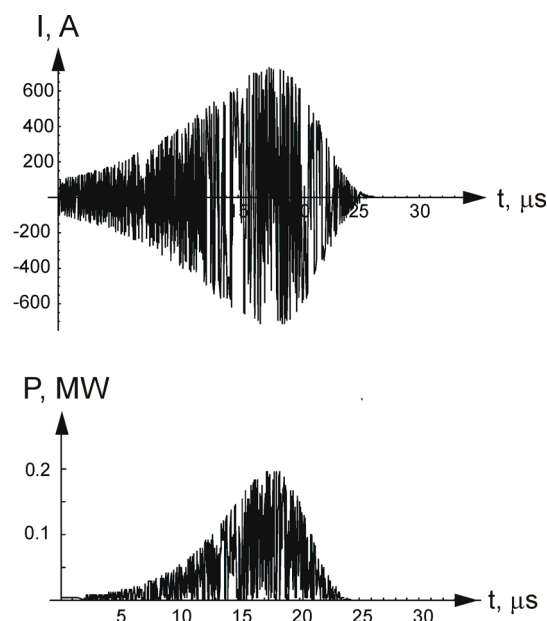


Рис. 5. Ток и мощность излучения с учетом электрических и магнитных потерь

Литература

1. Сахаров А. Д. // УФН. 1966. Т. 88. С. 725.
2. Proc. of Megagauss VII Magnetic Field Generation and Pulsed Power Applications. 1996.
3. Прищепенко А. Б., Щелкачев М. В. // Электричество. 1993. Т. 8. С. 31.
4. Kekez M. M. // Proc. Megagauss-10. 2004. P. 135.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Классическая теория поля. 1962.
6. Афанасьев Ю. В., Климов В. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 101. С. 1118.
7. Schelkunoff S. A., Friis H. T. Antennas: Theory and practice. 1952.
8. Jackson J. D. Classical Electrodynamics, 2nd edition. 1975.

INFLUENCE OF RADIATIVE LOSSES ON THE OSCILLATION PROCESSES IN THE CIRCUIT "FLUX COMPRESSION GENERATOR – CAPACITIVE LOAD"

V. G. Baryshevsky, A. A. Gurinovich

Flux compression generator (FCG) acting on a capacitive load induces oscillations in the circuit "FCG – capacitive load" that causes radio frequency radiation [3, 4]. It is emitted from the loops of FCG coil that can be considered as a helical antenna [3]. In the present paper the capacitive load is shown to be the source of the radiative losses, too. The equations describing operation of the "FCG – capacitive load" circuit in time are obtained considering radiative reaction force [8]. This force accompanies radiation process due to appearing of the time-dependent electromotive force in the above circuit. It is demonstrated that radiative reaction force significantly influences on temporary evolution and power of the RF signal from such a circuit.

ОДНОМЕРНАЯ И ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛИ СПИРАЛЬНОГО МАГНИТОКУМУЛЯТИВНОГО ГЕНЕРАТОРА: ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

С. Н. Сытова, В. В. Тихомиров, С. Л. Черкас

1. Введение

Магнитокумулятивный генератор, использующий химическую энергию взрывчатого вещества для движения проводящей оболочки в магнитном поле и сжатия магнитного потока, остается единственным компактным одноразовым источником, способным генерировать большие токи [1]. История исследования различных типов МКГ насчитывает свыше пятидесяти лет. Область применения МКГ довольно обширна: геофизика, испытание молниезащитного оборудования, источники питания для генераторов широкополосного излучения и т. д.

Для успешного конструирования МКГ с заданными параметрами требуется предварительное компьютерное моделирование. В работе [2] приведены простые формулы для индуктивности и сопротивления многокаскадного МКГ, позволяющие создавать так называемые «одномерные» компьютерные коды [3]. Следует также отметить и «нуль-мерный» код [4], который является очень быстрым благодаря использованию аппроксимации для индуктивности соленоида конечной длины [5] и предположения о пространственной однородности плотности магнитной энергии внутри МКГ. Несомненным преимуществом таких программ является их простота, достигаемая за счет использования приближений, которые хотя и не позволяют учесть детальное распределение токов по лайнеру, однако дают возможность с достаточной точностью рассчитывать величины токов и напряжений в системе МКГ – нагрузка.

Более сложные «двумерные» [6, 7] и «трехмерные» [8, 9] физико-математические модели МКГ и компьютерные программы, их реализующие, позволяют учесть динамику движения лайнера и нелинейную диффузию магнитного поля, произвести точный подсчет индуктивности МКГ, запаздывания времени установления точки контакта и др. Такого рода алгоритмы требуют гораздо большего компьютерного времени и необходимы для финального моделирования системы. Для предварительного выбора параметров системы удобно пользоваться простыми программами.

Целью данной работы является сравнение одномерной и двумерной моделей, реализованных в виде компьютерных программ, с экспериментальными данными, полученными в НИИ ЯП БГУ для многосекционного МКГ.

2. Одномерная модель МКГ

МКГ состоит из блока накачки, лайнера, соленоида и нагрузки. Как известно [1], такой генератор может быть описан на основе электротехнического уравнения относительно тока $I(t)$ с меняющимися во времени индуктивностью $L(t)$ и сопротивлением $R(t)$ МКГ:

$$\frac{dI(t)}{dt}(L(t) + L_n) + I(t)\left(\frac{dL(t)}{dt} + R(t) + R_n\right) = 0, \quad (1)$$

где L_n , R_n – индуктивность и сопротивление нагрузки.

Схема МКГ длиной l_s радиусами обмотки ρ и арматуры r изображена на рис. 1. Можно выделить 3 области: область (1) перед расширяющимся лайнером, «конус» (2) расширяющегося лайнера и область (3) с витками, замкнутыми лайнером. С течением времени конус лайнера смещается вправо со скоростью, равной скорости детонационной волны. В каждый момент времени форма медного лайнера МКГ задается функцией $r(x, t)$.

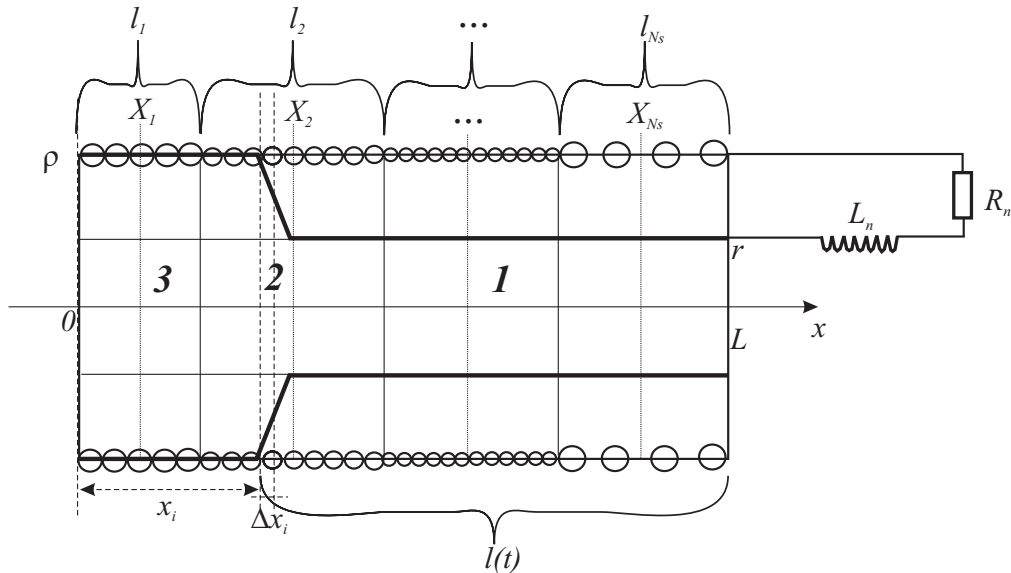


Рис. 1. МКГ с неравномерной намоткой

Для описания зависящих от времени индуктивности и сопротивления воспользуемся следующей простой моделью [2]. Поскольку время протекания процессов в МКГ составляет микросекунды, то магнитное поле не успевает проникнуть в область, ограниченную лайнером, поэтому в первом приближении эта область может считаться сверхпроводящей. Для расчета индуктивности рассмотрим соленоид со сверхпроводящей сердцевинной радиуса r . Плотность тока, протекающего по поверхности соленоида, может быть разложена на составляющую $j_{\parallel}$, параллельную оси соленоида, и перпендикулярную ей циркулярную составляющую $j_{\perp}$ (рис.2).

Если мысленно разрезать соленоид и развернуть поверхность (рис. 2), то получится, что эти составляющие связаны соотношением $j_{\perp} = j_{\parallel} \tan \theta = j_{\parallel} \frac{2\pi\rho}{h}$, где h – шаг намотки соленоида.

Записав энергию магнитного поля как сумму энергий параллельного и цир-

кулярного токов, а затем, разделив результат на $I_{\parallel}^2/2$, где полный параллельный ток равен $I_{\parallel} = j_{\parallel} 2\pi\rho\delta$ и δ – толщина скин-слоя, найдем индуктивность, приходящуюся на единицу длины соленоида [2]:

$$\frac{dL}{dx} = \frac{\mu_0\pi\rho}{h^2(x)}(\rho^2 - r^2(x,t)) + \frac{\mu_0}{2\pi} \ln \frac{\rho}{r(x,t)}, \quad (2)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м. В выражении (2) учитывается неравномерность намотки соленоида с шагом $h(x)$, а также зависимость радиуса лайнера от координаты x и времени t . Множителем $(\rho^2 - r^2)/\rho^2$ учитывается тот факт, что магнитное поле не успевает проникнуть в область, занятую лайнером, и, таким образом, эта область не дает вклада в энергию системы. Интегрирование по x дает индуктивность МКГ при определенном положении лайнера в данный момент времени.

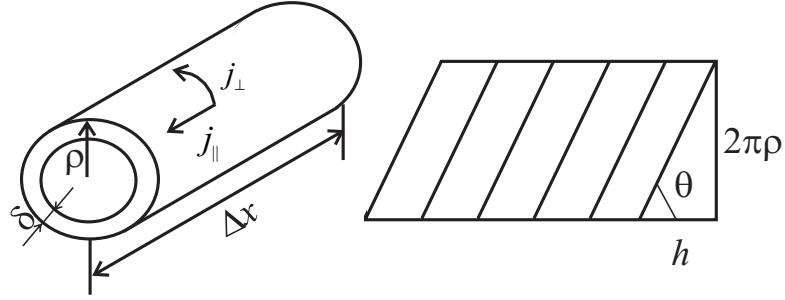


Рис. 2. Токовая поверхность МКГ и ее развертка

Вывод формулы для сопротивления МКГ заключается в расчете диссипируемой в объеме проводника ΔV энергии $\Delta W = \eta j^2 \Delta V$, которая складывается из энергий $\Delta W_{\parallel}$, $\Delta W_{\perp}$, соответствующих параллельному и циркулярному токам. Сопротивление МКГ равно отношению полной диссипируемой в единицу времени энергии к квадрату параллельного тока $\Delta R = \Delta W / I_{\parallel}^2$. С учетом того, что ток протекает в тонком скин-слое толщиной δ , находим:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta W_{\perp}}{I_{\parallel}^2} &= \frac{j_{\perp}^2 \eta 2\pi\rho\delta\Delta x}{(j_{\parallel} 2\pi\rho\delta)^2} = \frac{j_{\perp}^2}{j_{\parallel}^2} \frac{\eta\Delta x}{2\pi\rho\delta} = \frac{2\pi\rho\eta}{h^2\delta} \Delta x, \\ \frac{\Delta W_{\parallel}}{I_{\parallel}^2} &= \frac{j_{\parallel}^2 \eta 2\pi\rho\delta\Delta x}{(j_{\parallel} 2\pi\rho\delta)^2} = \frac{\eta}{2\pi\rho\delta} \Delta x, \end{aligned}$$

где η – удельное сопротивление материала обмотки и лайнера. Суммируя диссипируемые энергии (в единицу времени), выделяющиеся как на катушке, так и на лайнере, приходим к конечной формуле [2]:

$$\frac{dR}{dx} = \frac{2\pi\eta}{h^2(x)\delta} \left(\frac{\rho}{K} + r(x,t) \right) + \frac{\eta}{2\pi\delta} \left(\frac{1}{\rho} + \frac{1}{r(x,t)} \right), \quad (3)$$

где введен коэффициент заполнения K , равный отношению диаметра металлической жилы провода к полному диаметру провода. Этим коэффициентом учитывается то, что ток течет только по металлу и, таким образом, реальное сечение, по которому течет ток, в K раз меньше.

Скин-слой существенно влияет на сопротивление МКГ. Его изменение в зависимости от производной тока ВМГ можно приближенно представить следующим образом:

$$\frac{\eta}{\delta} \rightarrow k \sqrt{\frac{dI(t)/dt}{I(t)}} + \frac{\eta}{d}, \quad (4)$$

где феноменологический коэффициент k равен примерно $k = 1.47 \times 10^{-7}$ и может уточняться по результатам экспериментальных исследований, d – диаметр провода. Формула (4) означает, что в (3) величина η/δ в каждый момент времени заменяется выражением правой части (4).

3. Двумерная модель МКГ

Изложим теперь основы двумерной модели. Следует заметить, что в катушке МКГ параллельный и перпендикулярный оси токи жестко связаны через шаг намотки. В то же время на лайнере и других деталях МКГ (например, фланцах) могут возбуждаться круговые токи, что в конечном итоге препятствует проникновению магнитного поля в область, ограниченную лайнером и данными деталями МКГ. Базовой формулой для двумерного моделирования является взаимоиנדуктивность $\mathbf{M}(\rho, a, r, b, s)$ двух колец радиусами ρ , r и ширинами a , b , находящихся на расстоянии s . Формулы для данной величины могут быть выведены интегрированием или взяты из справочника [10].

Обозначим параллельную оси МКГ компоненту тока I_z . Как уже говорилось выше, плотность циркулярного тока в катушке жестко связана с током I_z через шаг намотки. Лайнер можно разбить на витки толщиной Δx_i , причем радиус каждого витка меняется со временем, что соответствует расширению витка, когда до него доходит детонационная волна. В витках возбуждаются токи I_i^θ за счет взаимоиנדукции с соленоидом обмотки.

На рисунке 1 введены следующие обозначения: $l(t)$ – длина неотребовавшего лайнера, l_k – длина k -й секции; X_k – центр k -й секции, $k = 1, \dots, N_s$; N_s – число секций ВМГ; x_i – координата центра i -го контура-витка; $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ – шаг i -го контура-витка, $i = 1, \dots, N$, где N – число контуров-витков, на которое разбивается лайнер; j_s – номер самой левой секции, внутри которой находится конус лайнера. Перед началом работы $j_s = 1$.

Система уравнений для многосекционного ВМГ выглядит следующим образом:

$$(L_z + L_n) \frac{dI_z}{dt} + \sum_{i=1}^N \left(M_{zi} \frac{dI_i^\theta}{dt} + I_i^\theta \frac{d\tilde{M}_{zi}}{dt} \right) + \left(R_z + R_n + \frac{dL_z}{dt} \right) I_z = 0, \quad (5)$$

$$\left(M_{zi} \frac{dI_z}{dt} + I_z \frac{d\tilde{M}_{zi}}{dt} \right) + \sum_{j=1}^N \left(M_{ij}^\theta \frac{dI_j^\theta}{dt} + I_j^\theta \frac{d\tilde{M}_{ij}^\theta}{dt} \right) + R_i^\theta I_i^\theta = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N, \quad (6)$$

$$L_z(t) = \frac{\mu_0}{2\pi} \sum_{r_i < R} \ln \left(\frac{\rho}{r_i} \right) \Delta x_i + \sum_{k=j_s}^{N_s} \sum_{n=j_s}^{N_s} \frac{l_k l_n}{h_k h_n} \mathbf{M}(\rho, l_n, \rho, l_k, X_n - X_k), \quad (7)$$

представляет собой индуктивность соленоида многосекционного МКГ (без лайнера).

Взаимоиндуктивность соленоида с i -м витком лайнера вычисляется следующим образом:

$$M_{zi} = \sum_{k=j_s}^{N_s} \frac{l_k}{h_k} \mathbf{M}(\rho, l_k, r_i, \Delta x_i, X_k - x_i).$$

Следует отметить, что длины катушек l_k постоянны во времени за исключением катушки $l_{j_s}(t)$, которая в данный момент «проходится» лайнером.

$M_{ij}^\theta = \mathbf{M}(r_i(t), \Delta x_i, r_j(t), \Delta x_j, x_i - x_j)$ – взаимоиנדуктивности витков лайнера. Тильда в $\tilde{M}_{zi}$ и $\tilde{M}_{ij}^\theta$ означает, что при их расчете нужно считать, что лайнер доходит только до внутренней изоляции провода обмотки, а не до металлической жилы.

Сопротивление вычисляется из тех же принципов, что и в одномерной модели:

$$R_z = \sum_{i=1}^N \frac{\eta \Delta x_i}{2\pi r_i \delta} + \sum_{m=j_s}^{N_s} l_m \left(\frac{2\pi \eta \rho}{\delta K_m} \frac{1}{h_m^2} + \frac{\eta}{2\pi \rho \delta} \right), \quad (8)$$

$$R_i^\theta = \frac{2\pi \eta}{\delta} \frac{r_i(t)}{\Delta x_i},$$

где δ – толщина скин-слоя, K_m – коэффициент заполнения m -й секции. Скин-слой моделируется с помощью подхода (4).

Возникает вопрос о постановке начальных условий для θ -токов МКГ в системе (5) – (6). Если накачка достаточно медленная, то можно представить, что в некоторый момент времени МКГ подсоединен к источнику постоянного напряжения и в нем устанавливается стационарный ток. При этом в начальный момент времени в лайнере возникают токи, препятствующие проникновению магнитного поля в лайнер, однако далее они затухают, так что на момент запуска МКГ ток будет существовать только в обмотке, а θ -токи считаются равными нулю: $I_i^\theta(0) = 0$. Если используется быстрая накачка, то токи в лайнере не успевают затухнуть, т. е. магнитное поле не будет проникать в лайнер уже на стадии накачки. В этом случае необходимо моделировать накачку и работу МКГ как единый процесс.

4. Приближенное вычисление эффективной индуктивности

Представляется полезным вывести формулу для точного расчета индуктивности МКГ $L_{z\text{eff}}(t)$ в случае сверхпроводящего лайнера. Эта индуктивность должна всегда быть меньше $L_z(t)$ в (7) и может быть измерена до начала работы МКГ с помощью генератора высокой частоты (разумеется, измерения должны проводиться со вставленным внутрь МКГ лайнером).

Положим $R_i^\theta = 0$. Тогда из (5) – (6) получается следующая система уравнений в векторном виде:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(L_z I_z) + \frac{d}{dt}(\vec{\mathbf{M}}_z \vec{\mathbf{I}}^\theta) + R_z I_z &= 0, \\ \frac{d}{dt}(\vec{\mathbf{M}}_z I_z) + \frac{d}{dt}(\mathbf{M}^\theta \vec{\mathbf{I}}^\theta) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\mathbf{M}^\theta = (M_{ij}^\theta)$ – матрица коэффициентов M_{ij}^θ , $\vec{\mathbf{M}}_z = (M_{zi})$ – вектор коэффициентов M_{zi} , $\vec{\mathbf{I}}^\theta = (I_i^\theta)$ – вектор токов I_i^θ .

Проинтегрируем второе уравнение:

$$\vec{\mathbf{M}}_z I_z + \mathbf{M}^\theta \vec{\mathbf{I}}^\theta = \vec{\mathbf{M}}_z(0) I_z(0).$$

Из него следует

$$\vec{\mathbf{I}}^\theta = (\mathbf{M}^\theta)^{-1} (-\vec{\mathbf{M}}_z I_z + \vec{\mathbf{M}}_z(0) I_z(0)), \quad (10)$$

где $(\mathbf{M}^\theta)^{-1}$ – обратная матрица. Подставляя (10) в (9), получим:

$$\frac{d}{dt}(L_z I_z) + \frac{d}{dt} \left(-\vec{\mathbf{M}}_z (\mathbf{M}^\theta)^{-1} \vec{\mathbf{M}}_z I_z + \vec{\mathbf{M}}_z (\mathbf{M}^\theta)^{-1} \vec{\mathbf{M}}_z I_z(0) \right) + R_z I_z = 0. \quad (11)$$

В процессе работы $I_z(t)$ становится много больше $I_z(0)$. Таким образом, вторым слагаемым в скобках можно пренебречь. Тогда уравнение (11) можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt}(L_{zeff} I_z) + R_z I_z = 0, \quad (12)$$

$$L_{zeff} = L_z(t) - \vec{\mathbf{M}}_z(t) (\mathbf{M}^\theta(t))^{-1} \vec{\mathbf{M}}_z(t). \quad (13)$$

Полученное выражение (13) для L_{zeff} можно использовать для проверки экспериментально измеренных индуктивностей, а также для введения поправочного коэффициента в программу по одномерному моделированию ВМГ. Это связано с тем, что приближенная формула (2) дает завышенное значение индуктивности.

5. Компьютерные программы моделирования МКГ

Для численного моделирования МКГ по моделям (1) – (4) и (5) – (8) были предложены разностные методы, на основе которых созданы компьютерные программы, написанные на языке Фортран. Интерфейс одной из программ приводится на рис. 3. Время работы этой программы составляет порядка минуты для расчетной сетки в 20 000 точек. Время работы двумерной программы моделирования МКГ по формулам (5) – (8) и (13) составляет несколько десятков минут.

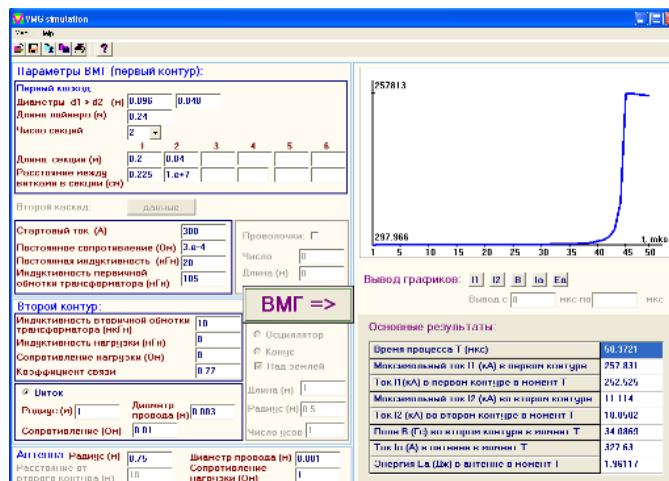


Рис. 3. Интерфейс программы VMG-1

6. Сравнение с экспериментом

МКГ, разработанный в НИИ ЯП, представлял собой пятисекционный МКГ с очень плавным выводом индуктивности в конце работы. В результате высота пиков напряжения между лайнером и обмоткой была примерно одна и та же в процессе всей работы генератора (рис. 4). Данный МКГ предназначен для получения большого тока без каких-либо требований на ширину выходного импульса. Рассчитанная начальная индуктивность со вставленным внутрь лайнером $L_{z\text{eff}}$ составила 265 мкГн, в то время как измеренная экспериментально была 263 мкГн. По одномерной модели расчет начальной индуктивности давал 309 мкГн, поэтому в одномерных расчетах использовался поправочный коэффициент для индуктивности 0.85.

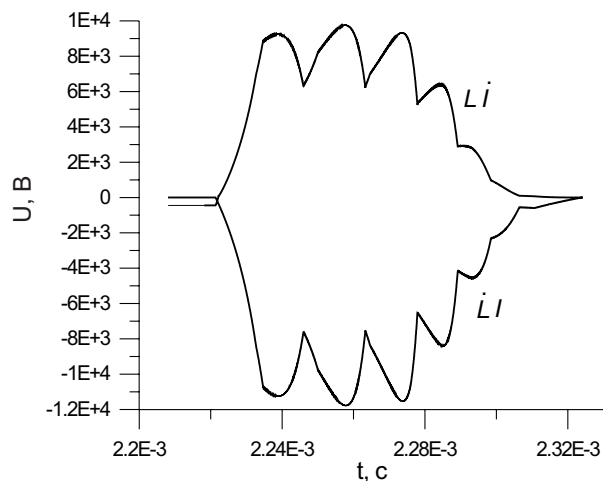


Рис. 4. Напряжение МКГ

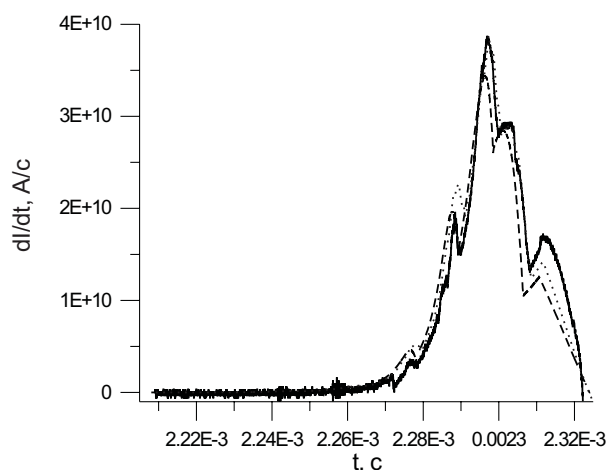


Рис. 5. Производная тока МКГ (— эксперимент, ----- одномерная модель, ... двумерная модель)

На рисунке 5 приведена экспериментальная кривая производной тока МКГ в сравнении с численными результатами, полученными по одномерной и двумерной моделям, описанным выше. Наиболее детальной экспериментальной информацией является зависимость производной тока от времени. Площадь под кривой численно равна максимальному току 0.9 МА, достигнутому в данном эксперименте. Расчет по одномерной и двумерной моделям проводились при одном и том же коэффициенте потерь и прочих входных параметрах. Уменьшая коэффициент потерь, можно добиться несколько лучшего совпадения с экспериментом и для одномерной модели. Преимущество двумерной модели состоит в том, что в ней не требуется вводить поправочный коэффициент в индуктивность. Кроме того, она в принципе позволяет точно учесть влияние фланцев и цилиндрических секций в передней и задней части обмотки, а также других деталей МКГ, в которых могут возбуждаться циркулярные токи. В расчетах данные элементы конструкции, так же как и лайнер, разбивались на витки, связанные взаимоиנדукциями между собой и с секциями обмотки и витками лайнера.

6. Заключение

Таким образом, одномерное моделирование дает приемлемую точность для предварительного проектирования МКГ. При этом необходимо вводить поправочный коэффициент для индуктивности, рассчитанной по одномерной модели, путем ее сравнения с $L_{z\text{eff}}$ из двумерной модели. Заметим, что феноменологический коэффициент при сопротивлении, учитывающий дополнительные потери магнитного потока, позволяет добиться удовлетворительного совпадения формы кривой для производной тока МКГ с экспериментальной как для двумерной, так и одномерной моделей.

Авторы статьи благодарят экспериментальную группу НИИ ЯП БГУ под руководством В. Г. Барышевского за предоставленные экспериментальные данные.

Литература

1. *Фортвов Е.В.* Взрывные генераторы мощных импульсов электрического тока. 2002.
2. *Павловский А.И., Людаев Р. З.* и др. // Труды III Междунар. конф. «Сверхсильные магнитные поля». 1984. С. 312.
3. *Pavlovsky A. I., Ludaev R. Z.* et al. //Megagauss Fields and Pulsed Power Systems. 1990. P. 233.
4. *Novac B. M., Smith I. R.* // Electromagnetic Phenomena. 2003. Vol. 3, № 4. P. 445.
5. *Wheeler H. A.* // Proc. Inst. Radio Eng. 1928. Vol. 16. P.1398.
6. *McGlaun J. M., Thomson S. L., Freeman J. R.* // Megagauss Physics and Technology. 1980. P. 193.
7. *Пикарь А.С., Дерюгин Ю.Н.* и др. //Труды VI Забабахинских научных чтений. 2001. С. 1.
8. *Salon S., Wendling P.* // Megagauss Fields and Pulsed Power Systems. 1990. P. 189.
9. *White D. A., Rieben R. N., Wallin B. K.* // Megagauss 2006 IEEE Int. Conf. 2006. P.371
10. *Калантаров П. Л., Цейтлин Л. А.* Расчет индуктивностей: Справочная книга. 1986. 488 с.

ONE-DIMENSIONAL AND TWO-DIMENSIONAL MODELS OF THE HELICAL FLUX COMPRESSION GENERATOR: NUMERICAL ANALYSIS AND COMPARISON WITH EXPERIMENT

S. N. Sytova, V. V. Tikhomirov, S. L. Cherkas

Comparison of one-dimensional and two-dimensional models of the helical flux compression generator with experimental results demonstrates that both models allow to obtain good agreement with experiments. In the frame of two-dimensional model a method of exact calculation of generator inductance with liner inside was proposed. Software packages implementing both models allow to calculate all parameters of the helical flux compression generator with variable winding steps.

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА МИКРОПУЗЫРЬКОВЫХ КОНТРАСТНЫХ АГЕНТОВ В УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ПОЛЯХ

А. А. Дойников

Ультразвук широко применяется в медицине и биологии [1–3]. В последние годы особое внимание привлекают технологии, основанные на использовании свободных (не имеющих оболочки) и так называемых контрастно-агентных микропузырьков. Последние представляют собой искусственно созданные газовые пузырьки микронного размера, заключенные в биологическую оболочку [4]. Оболочка необходима для того чтобы предотвратить быстрое растворение и слипание пузырьков. Контрастно-агентные пузырьки вводятся внутрь объекта (например, в кровеносную систему пациента) с целью повысить эффективность запланированного ультразвукового воздействия. Свободные пузырьки используются для той же цели, при этом они могут вводиться в объект извне, но могут и самопроизвольно возникать внутри объекта за счет акустической кавитации [5]. Присутствие пузырьков, которые усиливают ультразвуковой эхосигнал, позволяет существенно повысить качество изображения зондируемого объекта, обычно – внутренних органов пациента [3]. Эта техника широко используется в диагностической кардиологии для оценки состояния сердца, визуализации циркуляции крови и оценки перфузии миокарда [6]. Аналогичные методики применяются в радиологии и онкологии, где с их помощью исследуется кровяное течение в брюшной и периферийной сосудистой системе [7], а также в сосудах внутри опухолей [8]. Разрабатываются методики по использованию контрастно-агентных пузырьков для измерения физиологической и патологической перфузии мозга [9]. Примерами очень перспективных клинических применений контрастно-агентных технологий являются целевая интроскопия и локализованная доставка лекарства и генов [10, 11]. Для реализации этих методик создаются специальные инкапсулированные пузырьки, называемые целевыми контрастными агентами, которые поглощаются только определенными тканями или прилипают только к определенным местам в теле. В результате повышается акустический контраст между нормальными и аномальными частями органов, что улучшает выявление внутренних повреждений органов, воспалительных процессов и тромбов [12, 13]. Кроме того, целевые контрастные агенты могут переносить лекарство или гены, которые необходимо доставить к специфическому месту или ткани, что дает беспрецедентные возможности для высокоселективного терапевтического воздействия. Наряду с пользой присутствие микропузырьков может причинять вред. Динамика микропузырьков в незапланированном режиме может приводить к повреждению тканей, внутреннему кровотечению, гибели

клеток, образованию опасных свободных радикалов в крови и т. д. [14, 15]. Чтобы избежать вредных последствий и максимально повысить эффективность полезных процессов, необходимо хорошо знать физические механизмы вышеописанных явлений, уметь их моделировать и предсказывать результат тех или иных действий.

В ныне проводимых исследованиях доминирует экспериментальное направление, тогда как разработка теоретических основ динамики контрастных агентов существенно отстает. Общий подход, который используется в подавляющем большинстве теоретических работ, заключается в простом переносе результатов, полученных в области физической акустики, на биологические системы. При этом специфика биологических систем либо полностью, либо в весьма значительной степени игнорируется. Например, для описания радиальных пульсаций микропузырьков (и свободных, и заключенных в оболочку), находящихся в биологической жидкости (крови), используются различные формы уравнения Рэлея – Плэссета, которое было получено в физической акустике для обычных газовых пузырьков, окруженных ньютоновской жидкостью (водой). Для того чтобы учесть неньютоновские свойства крови и присутствие оболочки в уравнение Рэлея – Плэссета феноменологически вводятся различные дополнительные члены [16–19]. Однако эксперименты показывают, что такой полупирический подход не позволяет корректно описать ряд важнейших эффектов, происходящих в реальных биологических системах [20, 21]. В настоящее время совершенно очевидно, что дальнейшее развитие ультразвуковых микропузырьковых технологий настоятельно требует тщательных теоретических и численных исследований, которые должны строго учитывать специфическое реологическое поведение пузырьковой оболочки и окружающей биологической жидкости. Результаты, полученные при выполнении данной работы, позволяют продвинуться по пути решения указанной проблемы.

1. Контрастные агенты с альбуминовой и полимерной оболочкой

Наиболее математически строгая модель, описывающая радиальную пульсацию сферического газового пузырька с оболочкой из альбумина или полимера, была предложена Черчем [17]. Основным недостатком этой модели является пренебрежение трансляционным движением пузырька и акустическими потерями на переизлучение звука, происходящими вследствие конечной сжимаемости окружающей жидкости. Кроме этого, Черч некорректно вычислил внутренний радиус пузырьковой оболочки, соответствующий ненапряженному состоянию материала оболочки. В результате его модель может быть правомочной только для контрастных агентов с тонкой оболочкой, которая является полностью проницаемой для газа. Тогда как в настоящее время широко используются контрастные агенты с толстыми оболочками, которые обеспечивают продленное время жизни пузырьков.

Чтобы устранить недостатки модели Черча, был сделан строгий вывод физических уравнений, управляющих радиальной и трансляционной динамикой инкапсулированного газового пузырька в ультразвуковом поле. Этот вывод ос-

новывается на использовании Лагранжева формализма, предполагая, что инкапсулирующий слой ведет себя как несжимаемое вязкоупругое твердое тело, подчиняющееся материальному уравнению Кельвина – Войхта [22]. Поправки на сжимаемость окружающей жидкости были введены в уравнение радиального движения пузырька посредством вычисления кинетической и потенциальной энергии окружающей жидкости с точностью до первого порядка по числу Маха. При этом был использован подход, разработанный в работе [23]. Вязкие эффекты в окружающей жидкости и в пузырьковой оболочке учитывались посредством использования надлежащих диссипативных функций в процессе применения Лагранжевой техники. Было также получено корректное выражение для внутреннего радиуса пузырьковой оболочки, соответствующего ненапряженному состоянию материала оболочки. Вычисление было выполнено посредством использования строгих уравнений теории упругости, предполагая, что оболочка может быть произвольной толщины и непроницаемой для газа, как это имеет место в случае толстостенных контрастных агентов третьего поколения таких, как Quantison и Муомар [18]. Более подробно данный вывод описывается в статьях [24] и [25], которые были опубликованы по результатам настоящей работы. Окончательная система уравнений пузырькового движения имеет вид

$$\begin{aligned}
R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_S}{\rho_S} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \left(\frac{\rho_L - \rho_S}{\rho_S} \right) \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] - \frac{1}{c} \frac{\rho_L}{\rho_S} H = \\
= \frac{\rho_L}{\rho_S} \frac{\dot{x}^2}{4} + \frac{1}{\rho_S} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right] - \\
- \frac{4\dot{R}_1}{\rho_S R_1 R_2^3} \left[\eta_L R_1^3 + \eta_S (R_{20}^3 - R_{10}^3) \right] - \frac{4\mu_S (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\rho_S R_2^3} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_1} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_1} \right) \left(1 - \frac{3R_1^3}{R_2^3} \right) \right], \\
m_b \ddot{x} + \frac{2\pi}{3} \rho_L \frac{d}{dt} (R_2^3 \dot{x}) = - \frac{4\pi}{3} R_2^3 \frac{\partial}{\partial x} P_{ac}(x, t) + F_d.
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $R_1(t)$ и $R_2(t)$ – внутренний и внешний радиусы пузырьковой оболочки, точка сверху обозначает производную по времени, ρ_L – равновесная плотность окружающей жидкости, ρ_S – плотность пузырьковой оболочки, c – скорость звука в окружающей жидкости, $x(t)$ – положение центра пузырька, P_{g0} – равновесное давление газа внутри пузырька, которое определяется как

$$P_{g0} = P_0 + \frac{2\sigma_1}{R_{10}} + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} + 4\mu_S \left(1 - \frac{R_{10}^3}{R_{20}^3} \right) \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_{10}} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_{10}} \right) \left(1 - \frac{3R_{10}^3}{R_{20}^3} \right) \right], \tag{3}$$

R_{10} и R_{20} – внутренний и внешний радиусы оболочки в состоянии покоя, σ_1 и σ_2 – коэффициенты поверхностного натяжения на границах раздела газ – оболочка и жидкость – оболочка соответственно, P_0 – гидростатическое давление в окружающей жидкости, $P_{ac}(x, t)$ – задающее акустическое давление в точке на-

хождения пузырька, η_L – коэффициент сдвиговой вязкости окружающей жидкости, η_s – коэффициент сдвиговой вязкости оболочки, μ_s – модуль сдвига оболочки, R_{1e} – ненапряженное равновесное положение границы раздела газ – оболочка, определяемое как

$$R_{1e} = R_{10} \left[1 - \frac{1}{4\mu_s} \left(P_0 + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} \right) \frac{R_{20}^3}{R_{10}^3} \right], \quad (4)$$

m_b – масса пузырька и, наконец, F_d обозначает силу вязкого сопротивления

$$F_d = -\frac{1}{4} \pi \eta_L R_2 \dot{x} (24 + 9 \rho_L R_2 |\dot{x}| / \eta_L). \quad (5)$$

Функция H в уравнении (1), которая отвечает за акустические потери, вычисляется посредством следующего уравнения:

$$H = \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1}{R_2} \right]^{-1} \left\{ R_1 \frac{dG}{dt} + 2R_1 \dot{R}_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1^4}{R_2^4} \right] + 2\dot{R}_1^3 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1^4 (2R_2^3 - R_1^3)}{R_2^7} \right] \right\}, \quad (6)$$

где G обозначает правую сторону (1). Уравнение (1) управляет радиальной пульсацией пузырька, а (2) – его трансляцией.

Таким образом, разработанная теоретическая модель включает два обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнения: радиальное уравнение (1) и трансляционное уравнение (2). Они дополняются уравнениями (3) – (6) и соотношением $R_2^3 - R_1^3 = R_{20}^3 - R_{10}^3$, которое вытекает из предположения о несжимаемости пузырьковой оболочки. Начальные условия для этих уравнений имеют вид: $R_1(0) = R_{10}$, $R_2(0) = R_{20}$, $\dot{R}_1(0) = \dot{R}_2(0) = 0$, $x(0) = x_0$, $\dot{x}(0) = 0$. Одновременное численное решение указанных уравнений позволяет получить изменяющийся во времени радиус инкапсулированного пузырька и его трансляционную траекторию.

2. Контрастные агенты с липидной оболочкой

Анализ экспериментальных данных, имеющихся в литературе, показывает, что вязкоупругое твердое тело не является адекватной аппроксимацией для липидного покрытия. Специфический динамический отклик липидного монослоя на сжатие и растяжение, относительно низкие резонансные частоты липидных контрастных агентов и механизмы их разрушения указывают, что липидные оболочки обладают свойствами, нехарактерными для вязкоупругого твердого тела Кельвина – Войхта [21, 26, 27]. В экспериментальных статьях по липидным оболочкам сообщается, что они состоят из твердых зон, окруженных стекловидной или жидкой средой [28–31]. Разумно предположить, что такая структура имеет свойства вязкоупругой жидкости, а не вязкоупругого твердого тела.

Вследствие этого для контрастных агентов с липидной оболочкой была разработана модель, которая аппроксимирует реологическое поведение липидного монослоя посредством линейного 3-константного материального уравнения Олдройда. Подход, примененный при разработке данной модели, основывается на использовании граничных условий для давления на внутренней и внешней поверхности пузырьковой оболочки. В результате было получено следующее общее уравнение для радиальной пульсации инкапсулированного пузырька:

$$R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] = \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - P_0 - P_{ac}(x, t) + 3 \int_{R_1}^{R_2} \frac{\tau_{rr}^{(S)}(r, t)}{r} dr + 3 \int_{R_2}^{\infty} \frac{\tau_{rr}^{(L)}(r, t)}{r} dr \right], \quad (7)$$

где $\beta = (\rho_L - \rho_s) / \rho_s$, $\tau_{rr}^{(S)}$ – девиатор напряжения для пузырьковой оболочки, а $\tau_{rr}^{(L)}$ – девиатор напряжения для окружающей жидкости. Было принято, что $\tau_{rr}^{(S)}(r, t)$ подчиняется следующему уравнению, известному как линейное 3-константное уравнение Олдройда [22]:

$$\tau_{rr}^{(S)} + \lambda_{s1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(S)}}{\partial t} = 2\eta_s \left(v_{rr} + \lambda_{s2} \frac{\partial v_{rr}}{\partial t} \right). \quad (8)$$

Здесь $v_{rr} = \partial v / \partial r$ – радиальная компонента тензора скоростей деформации, v – скорость внутри оболочки, λ_{s1} – время релаксации оболочки, η_s – сдвиговая вязкость оболочки, а λ_{s2} – время ретардации оболочки. Можно показать, что девиатор $\tau_{rr}^{(S)}(r, t)$, удовлетворяющий уравнению (8), может быть записан как

$$\tau_{rr}^{(S)}(r, t) = -4\eta_s \frac{D_s(t)}{r^3}, \quad (9)$$

где функция $D_s(t)$ подчиняется уравнению

$$D_s + \lambda_{s1} \dot{D}_s = R_1^2 \dot{R}_1 + \lambda_{s2} (R_1^2 \ddot{R}_1 + 2R_1 \dot{R}_1^2). \quad (10)$$

Соответственно первый интеграл в (7) вычисляется как

$$3 \int_{R_1}^{R_2} \frac{\tau_{rr}^{(S)}(r, t)}{r} dr = -4\eta_s \frac{D_s(t) (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3}. \quad (11)$$

Реологическое поведение окружающей жидкости тоже аппроксимируется уравнением Олдройда:

$$\tau_{rr}^{(L)} + \lambda_{L1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(L)}}{\partial t} = 2\eta_L \left(v_{rr} + \lambda_{L2} \frac{\partial v_{rr}}{\partial t} \right), \quad (12)$$

где η_L – сдвиговая вязкость жидкости, λ_{L1} – время релаксации жидкости, а λ_{L2} – время ретардации жидкости. В случае $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$ (12) дает уравнение для

обычной вязкой жидкости. Поэтому предлагаемая здесь модель может использоваться как для описания лабораторных экспериментов, где в качестве окружающей жидкости обычно используется вода, так и для описания клинических приложений, где окружающей жидкостью является кровь. Выражение для $\tau_{rr}^{(L)}(r, t)$, удовлетворяющее (12), может быть представлено как

$$\tau_{rr}^{(L)}(r, t) = -4\eta_L \frac{D_L(t)}{r^3}, \quad (13)$$

где функция $D_L(t)$ является решением следующего уравнения:

$$D_L + \lambda_{L1} \dot{D}_L = R_1^2 \dot{R}_1 + \lambda_{L2} (R_1^2 \ddot{R}_1 + 2R_1 \dot{R}_1^2). \quad (14)$$

В результате второй интеграл в уравнении (7) принимает вид

$$3 \int_{R_2}^{\infty} \frac{\tau_{rr}^{(L)}(r, t)}{r} dr = -4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3}. \quad (15)$$

Подстановка (11) и (15) в (7) приносит

$$\begin{aligned} & R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] \\ &= \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - 4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3} - 4\eta_s \frac{D_s(t)(R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Это уравнение может быть модифицировано, чтобы учесть трансляционное движение пузырька и акустические радиационные потери на переизлучение звука. Модификация выполняется путем прямого заимствования необходимых поправок из уравнений (1) и (2), полученных для альбуминовых контрастных агентов. В результате получаем

$$\begin{aligned} & R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] - \frac{1}{c} \frac{\rho_L}{\rho_s} H = \frac{\rho_L}{\rho_s} \frac{\dot{x}^2}{4} \\ &+ \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - 4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3} - 4\eta_s \frac{D_s(t)(R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Функция H в (17) как и ранее находится из (6), но G в (6) есть теперь правая сторона (17), а не (1). Газовое давление внутри пузырька вычисляется как

$$P_{g0} = P_0 + \frac{2\sigma_1}{R_{10}} + \frac{2\sigma_2}{R_{20}}. \quad (18)$$

Трансляционное уравнение остается тем же самым, см. уравнение (2), с вязкой силой, даваемой выражением (5).

Таким образом, в случае контрастно-агентного пузырька с липидной оболочкой мы имеем систему из четырех обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений: (17), (2), (10) и (14). Эта система дополняется уравнениями

(6) для функции H , (5) для вязкой силы F_d и (18) для газового давления P_{g0} . Начальные условия задаются следующим образом: $R_1(0) = R_{10}$, $R_2(0) = R_{20}$, $\dot{R}_1(0) = \dot{R}_2(0) = 0$, $x(0) = x_0$, $\dot{x}(0) = 0$ и $D_s(0) = D_L(0) = 0$. Более подробно представленные здесь вычисления описываются в статье [32].

3. Динамика контрастных агентов с альбуминовой и полимерной оболочкой в режиме линейных осцилляций

Предполагая, что падающее ультразвуковое поле является слабым (диагностическим), и линеаризуя (1), получаем

$$\ddot{\xi} + \delta_{KV} \dot{\xi} + \omega_{0KV}^2 \xi = -\frac{P_{ac}(t)}{\alpha \rho_s R_{10}}. \quad (19)$$

Величина ξ , которая обозначает малое изменение радиуса пузырька, определяется как $R_1(t) = R_{10} + \xi(t)$ при условии, что $|\xi| \ll R_{10}$. Индекс KV означает «Kelvin – Voigt», указывая, что реологическое поведение пузырьковой оболочки описывается уравнением Кельвина – Войхта. Предполагая, что акустическое давление $P_{ac}(t)$ имеет вид $P_{ac}(t) = P_a \exp(i\omega t)$, где P_a – амплитуда давления, а ω – задающая частота, для других величин, входящих в (19), получаем:

$$\alpha = 1 - (1 - \rho_L / \rho_s) R_{10} / R_{20}, \quad (20)$$

$$\delta_{KV} = \delta_r + \delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}, \quad (21)$$

$$\delta_r = \frac{\rho_L R_{10} \omega^2}{\alpha c \rho_s}, \quad (22)$$

$$\delta_{\eta L} = \frac{4\eta_L R_{10}}{\alpha \rho_s R_{20}^3}, \quad (23)$$

$$\delta_{\eta S}^{KV} = \frac{4\eta_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\alpha \rho_s R_{10}^2 R_{20}^3}, \quad (24)$$

$$\omega_{0KV}^2 = \frac{1}{\alpha \rho_s R_{10}^2} \left\{ 3\gamma P_{g0} - \frac{2\sigma_1}{R_{10}} - \frac{2\sigma_2 R_{10}^3}{R_{20}^4} + \frac{4\mu_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_{20}^3} \left[1 - \frac{1}{4\mu_s} \left(P_0 + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} \right) \left(3 + \frac{R_{20}^3}{R_{10}^3} \right) \right] \right\}, \quad (25)$$

где δ_{KV} – суммарная диссипативная постоянная, а ω_{0KV} – недемпфированная линейная резонансная частота пузырька. Основным интерес для практики, однако, представляет не ω_{0KV} , а реальная (демпфированная, учитывающая диссипативные потери) резонансная частота. Она вычисляется как

$$\omega_{KV} = \frac{1}{\beta \sqrt{3}} \left\{ \left[\beta^2 (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV})^2 + 4\beta (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}) + 6\beta^2 \omega_{0KV}^2 + 1 \right]^{1/2} - 2\beta (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}) - 1 \right\}^{1/2}, \quad (26)$$

где $\beta = \delta_r / \omega^2 = \rho_L R_{10} / (\alpha c \rho_s)$.

Используя (19) – (26), был выполнен сравнительный анализ линейной радиальной динамики пузырьков с альбуминовым и полимерным покрытием по отношению к результатам Черча [17]. Этот анализ выявил, что выражения, полученные Черчем, недооценивают демпфированные резонансные частоты инкапсулированных пузырьков с вязкоупругим твердым покрытием. Было также обнаружено, что вязкое демпфирование в пузырьковой оболочке может приводить к отсутствию резонансного отклика. Этот эффект наблюдается, когда равновесный радиус пузырька меньше, чем определенное пороговое значение, причем, чем толще оболочка, тем больше пороговое значение радиуса. При радиусах ниже этого порога амплитуда радиальных осцилляций монотонно убывает при увеличении задающей частоты, не демонстрируя резонансного пика. Детали этого исследования опубликованы в статье [25].

4. Линейный анализ динамики контрастных агентов с липидной оболочкой

Линейный анализ уравнения (17), полученного для липидных контрастных агентов, был выполнен, предполагая, что окружающая жидкость – вязкая ньютоновская среда. В этом случае $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$, и функция $D_L(t)$ становится равной

$$D_L(t) = R_1^2 \dot{R}_1. \quad (27)$$

Также предполагалось, что время ретардации липидной оболочки равно нулю. В результате уравнение (8) принимает вид

$$\tau_{rr}^{(S)} + \lambda_{S1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(S)}}{\partial t} = 2\eta_S \frac{\partial v}{\partial r}. \quad (28)$$

Это уравнение известно как максвелловское материальное уравнение. Поэтому модель липидного пузырька будет далее называть максвелловской моделью. Заметьте также, что с нулевым временем ретардации уравнение для $D_S(t)$ принимает вид

$$D_S + \lambda_{S1} \dot{D}_S = R_1^2 \dot{R}_1. \quad (29)$$

Учитывая эти предположения и линеаризируя (17), получаем

$$\ddot{\xi} + \delta_M \dot{\xi} + \omega_{0M}^2 \xi = -\frac{P_{ac}(t)}{\alpha \rho_S R_{10}}, \quad (30)$$

где ξ определяется уравнением $R_1(t) = R_{10} + \xi(t)$ при условии, что $|\xi| \ll R_{10}$, а остальные величины записываются как

$$\alpha = 1 - (1 - \rho_L / \rho_S) R_{10} / R_{20}, \quad (31)$$

$$\delta_M = \delta_r + \delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^M, \quad (32)$$

$$\delta_r = \frac{\rho_L R_{10} \omega^2}{\alpha c \rho_S}, \quad (33)$$

$$\delta_{\eta L} = \frac{4\eta_L R_{10}}{\alpha \rho_s R_{20}^3}, \quad (34)$$

$$\delta_{\eta S}^M = \frac{4\eta_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\alpha \rho_s R_{10}^2 R_{20}^3 [1 + (\lambda \omega)^2]}, \quad (35)$$

$$\omega_{0M}^2 = \omega_0^2 + \lambda \omega^2 \delta_{\eta S}^M, \quad (36)$$

$$\omega_0^2 = \frac{1}{\alpha \rho_s R_{10}^2} \left(3\gamma P_{g0} - \frac{2\sigma_1}{R_{10}} - \frac{2\sigma_2 R_{10}^3}{R_{20}^4} \right). \quad (37)$$

Величина δ_M – суммарная диссипативная постоянная, а ω_{0M} – недемпфированная линейная резонансная частота для максвелловской модели. Чтобы оценить демпфированную резонансную частоту уравнения (30), ищем решение этого уравнения как

$$\xi(t) = A \exp(i\omega t + i\phi), \quad (38)$$

где

$$\phi = \arctan \left[\omega \delta_M / (\omega^2 - \omega_{0M}^2) \right], \quad (39)$$

$$A = P_a Q(\omega) / (\alpha \rho_s R_{10} \omega_0^2), \quad (40)$$

$$Q(\omega) = \omega_0^2 / \left[(\omega^2 - \omega_{0M}^2)^2 + \omega^2 \delta_M^2 \right]^{1/2}. \quad (41)$$

Резонансный отклик пузырька с максвелловской оболочкой соответствует максимуму резонансной функции $Q(\omega)$. $Q(\omega)$ является довольно сложной функцией ω . Поэтому она была исследована численно. Демпфированная резонансная частота, полученная в ходе этого исследования, обозначается ниже как ω_M .

Был проведен сравнительный анализ демпфированных резонансных частот, даваемых максвелловской оболочечной моделью и моделью с оболочкой Кельвина – Войхта. Полученные результаты были также сравнены с предсказаниями так называемой вязкой оболочечной модели, которая предполагает, что инкапсуляция ведет себя как обычная вязкая жидкость, а также с резонансными частотами свободных пузырьков эквивалентного размера. Пример этого сравнения демонстрируется на рис. 1, который показывает резонансную частоту инкапсулированного пузырька как функцию равновесного пузырькового радиуса для трех упомянутых выше моделей при трех значениях оболочечной вязкости: $\eta_s = 0.5, 1.0$ и 1.5 Па·с. Штриховая линия соответствует свободному пузырьку эквивалентного размера. Рис. 1, а показывает, что вязкая оболочка уменьшает резонансную частоту по сравнению со свободным пузырьком и приводит к исчезновению резонансного отклика у малых пузырьков.

Наоборот, оболочка Кельвина – Войхта, рис.1, б, увеличивает резонансную частоту по отношению к свободному пузырьку. Для малых пузырьков, однако, вязкое демпфирование внутри оболочки снова приводит к исчезновению резонанса. Максвелловская модель, рис.1, в, показывает специфическое поведение: если вязкость оболочки не очень высока, резонансная частота пузырька может быть как ниже, так и выше, чем у свободного пузырька.

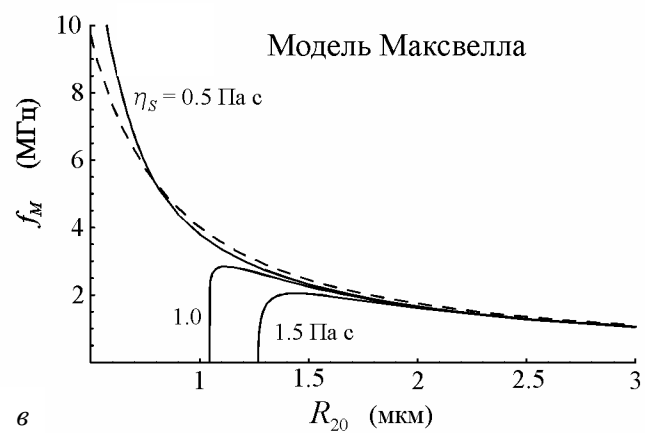
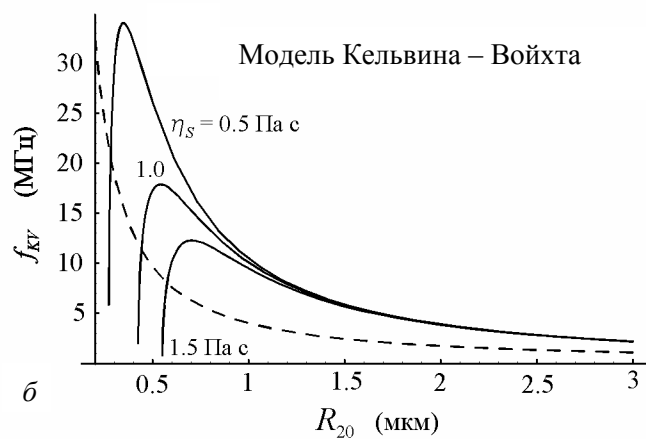
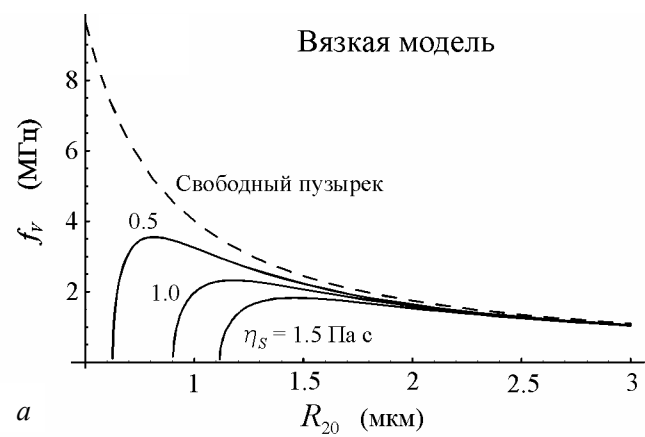


Рис. 1. Демпфированная резонансная частота как функция равновесного пузырькового радиуса для трех оболочечных моделей при трех значениях сдвиговой вязкости оболочки

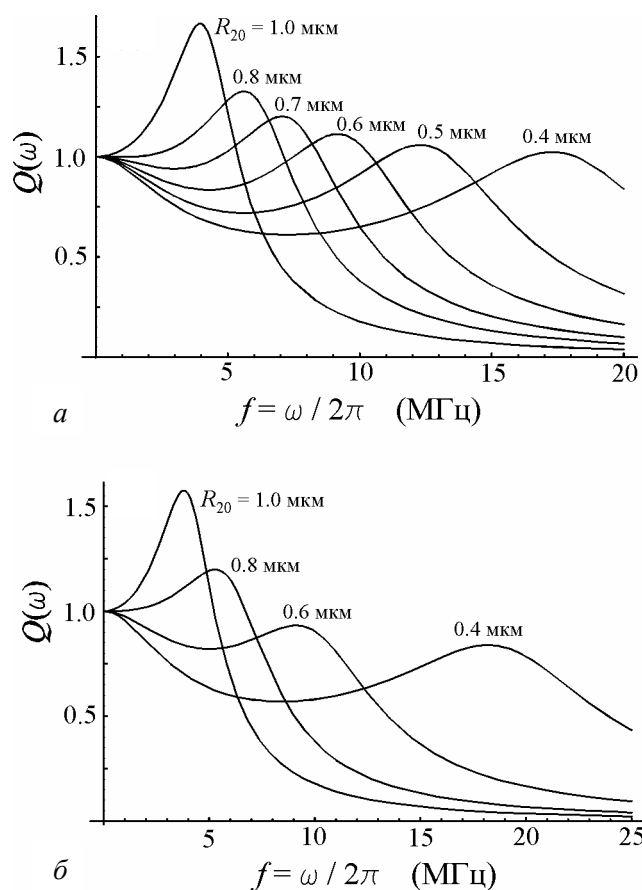


Рис. 2. Резонансная функция максвелловской оболочечной модели при различных значениях равновесного радиуса пузырька R_{20} :

$a - \lambda_{s1} = 0.025$ мкс, $\eta_s = 0.5$ Па с; $b - \lambda_{s1} = 0.02$ мкс, $\eta_s = 0.5$ Па с

Форма резонансной функции $Q(\omega)$ максвелловской модели, см. уравнение (41), тоже является специфической. Резонансные функции двух других моделей могут быть только двух типов: либо с глобальным резонансным пиком, либо, если резонансный отклик подавляется вязкостью оболочки, монотонно убывающими при возрастании задающей частоты.

На рисунке 2 показано, что резонансная функция максвелловской модели в диапазоне пузырьков размеров, соответствующих упругому режиму, может принимать форму кривой с локальным максимумом. Этот эффект приводит к появлению резонансного отклика у сколь угодно малых пузырьков. Однако интенсивность этой резонансной осцилляции может быть меньше, чем интенсивность нерезонансной осцилляции тех же пузырьков при более низкой задающей частоте (см. кривую для $R_{20} = 0.4$ мкм на рис. 2, б).

5. Акустические радиационные силы, действующие на пузырьки с альбуминовой и полимерной оболочкой

Чтобы вычислить радиационную силу, испытываемую контрастными агентами с альбуминовой и полимерной оболочкой, а также трансляционное движение агентов, вызываемое этой силой, были использованы уравнения (1) и (2). Вначале радиационная сила в слабом ультразвуковом поле была исследована, предполагая, что радиальная пульсация пузырька описывается уравнением (19). В этом случае радиационная сила вычисляется по формуле

$$\mathbf{F}_{en} = -\frac{4\pi}{3} \langle R_2^3(t) \nabla P_{ac}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (42)$$

где $\langle \rangle$ обозначает усреднение по времени, а $\mathbf{r}$ – радиус-вектор центра пузырька. Выражение для внешнего радиуса пузырька $R_2(t)$ в линейном режиме определяется как

$$R_2 = R_{20} + \frac{R_{10}^2}{R_{20}^2} \xi(t). \quad (43)$$

Подстановка (43) в (42) приносит

$$\mathbf{F}_{en} = -4\pi R_{10}^2 \langle \xi(t) \nabla P_{ac}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (44)$$

В случае плоской бегущей волны $P_{ac}(\mathbf{r}, t) = P_a \exp(i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, где $k = \omega/c$ – волновой вектор. Подставляя это выражение в (19), находим следующую формулу для $\xi(t)$:

$$\xi(t) = \frac{P_{ac}(\mathbf{r}, t)}{\alpha \rho_s R_{10} (\omega^2 - \omega_0^2 - i\omega\delta)}. \quad (45)$$

Подстановка (45) в (44) окончательно дает

$$F_{en} = \frac{2\pi P_a^2 R_{10} \omega \delta k}{\alpha \rho_s \left[(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2 \delta^2 \right]}. \quad (46)$$

Радиационная сила на свободный пузырек вычисляется как в работе[33]

$$F_{fr} = \frac{2\pi P_a^2 R_{20} \omega \delta_f k}{\rho_L \left[(\omega^2 - \omega_{0f}^2)^2 + \omega^2 \delta_f^2 \right]}, \quad (47)$$

где

$$\delta_f = \frac{\omega^2 R_{20}}{c} + \frac{4\eta_L}{\rho_L R_{20}^2}, \quad (48)$$

$$\omega_{0f} = \frac{1}{R_{20} \sqrt{\rho_L}} \left(3\gamma P_0 + \frac{2(3\gamma - 1)\sigma}{R_{20}} \right)^{1/2}. \quad (49)$$

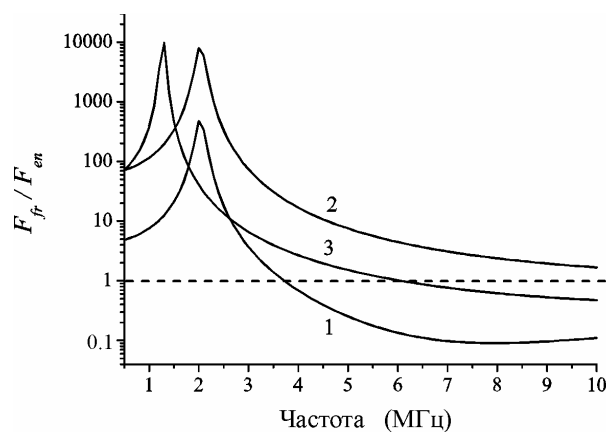


Рис. 3. Сравнение радиационных сил, действующих на инкапсулированный и свободный пузырек в слабом поле при разных задающих частотах: 1 – $R_{20} = 2$ мкм, $R_s = 15$ нм; 2 – $R_{20} = 2$ мкм, $R_s = 200$ нм; 3 – $R_{20} = 3$ мкм, $R_s = 200$ нм

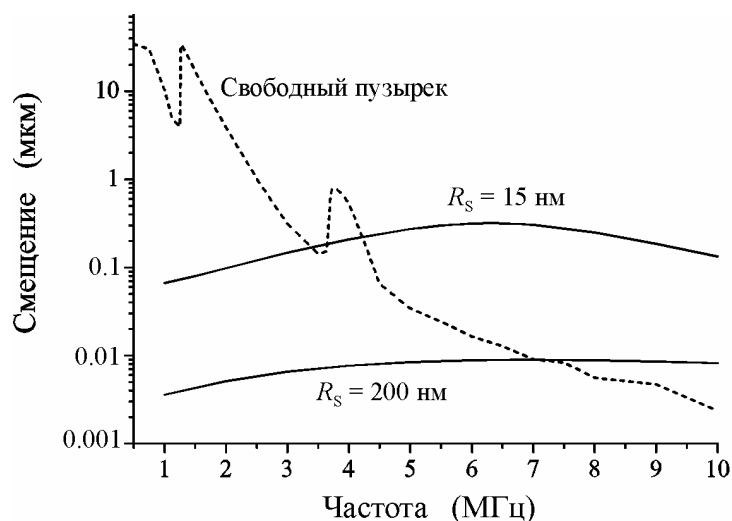


Рис. 4. Трансляционное смещение как функция задающей частоты для свободного и инкапсулированного пузырька

На рисунке 3 изображено отношение F_{fr}/F_{en} как функцию задающей частоты для трех пузырьков с различными значениями равновесного радиуса и толщины оболочки. Наличие инкапсуляции уменьшает амплитуду радиальной осцилляции контрастно-агентных пузырьков. По этой причине принято считать, что радиационная сила, действующая на инкапсулированный пузырек должна быть значительно меньше силы, действующей на свободный пузырек эквивалентного размера. Однако на рис. 3 видно, что это не так. При относительно

низких частотах, вблизи резонанса свободного пузырька, радиационная сила, испытываемая свободным пузырьком, действительно намного превышает силу, действующую на инкапсулированный пузырек. Однако при высоких частотах, в диапазоне резонанса инкапсулированных пузырьков, радиационная сила, испытываемая инкапсулированным пузырьком, превышает силу, действующую на свободный пузырек. Кривая 3 показывает, что этот эффект может иметь место даже для пузырька с толстой оболочкой, $R_s = 200$ нм, если его внешний радиус является достаточно большим.

На рисунке 4 показано трансляционное смещение свободного пузырька (штриховая линия) и двух эквивалентных инкапсулированных пузырьков с толщиной оболочки $R_s = \lim_{x \rightarrow \infty} 15$ нм и 200 нм при более сильном ультразвуковом воздействии. Пузырьки приводятся в движение 20-цикловым ультразвуковым импульсом с амплитудой давления 150 кПа. Смещение пузырьков из начального положения определяется после окончания импульса. Внешний радиус всех пузырьков равняется 2 мкм. Моделирование было выполнено посредством численного решения уравнений (1) и (2). Снова можно видеть, что при высоких частотах трансляционное смещение инкапсулированных пузырьков может быть значительно больше, чем свободных. Таким образом, в диапазоне относительно высоких частот инкапсулированные пузырьки способны перемещаться более эффективно, чем свободные пузырьки эквивалентного размера.

6. Акустические радиационные силы, действующие на пузырьки с липидной оболочкой

Для того чтобы оценить значения оболочечных параметров, которые используются в теоретической модели, разработанной для липидных контрастных агентов, были использованы имеющиеся в литературе экспериментальные данные для агента MP1950 [26]. Эти данные были получены для водного раствора MP1950, что позволяет положить $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$. В результате уравнение (12) сокращается к ньютоновскому вязкому закону. Экспериментальные кривые, описывающие зависимость пузырькового радиуса от времени, и соответствующие трансляционные смещения были получены в работе [26] для 18 пузырьков с равновесными радиусами от 0.79 до 2.81 мкм. Пузырьки облучались 20-цикловым акустическим импульсом с амплитудой давления 180 кПа и частотой 2.25 МГц. Чтобы оценить оболочечные параметры, была выполнена подгонка теоретических и экспериментальных кривых, описывающих зависимость радиуса пузырька от времени. Для подгонки использовался метод наименьших квадратов. С этой целью вычислялся минимум следующей суммы:

$$S = 100 \frac{\sum_n (R_n^{exp} - R_n^{th})^2}{\sum_n (R_n^{exp})^2}, \quad (50)$$

где R_n^{exp} и R_n^{th} – экспериментальное и теоретическое значение мгновенного радиуса пузырька. Вычисления выявили, что время ретардации для липидного покрытия является фактически нулевым. Поэтому все последующие вычисления

были выполнены при $\lambda_{s2} = 0$. Кроме этого, для простоты коэффициент поверхностного натяжения на границе газ-оболочка, σ_1 , был установлен равным нулю [34]. Таким образом, сумма (50) фактически минимизировалась посредством варьирования трех оболочечных параметров: λ_{s1} , η_s и σ_2 . Значения остальных физических параметров, использованных при данных вычислениях, были следующими: $P_0 = 101.3$ кПа, $\rho_L = 1000$ кг/м³, $\eta_L = 0.001$ Па·с, $c = 1500$ м/с, $\gamma = 1.07$, $\rho_S = 1100$ кг/м³ и $R_S = R_{20} - R_{10} = 2$ нм.

Было обнаружено, что σ_2 изменяется случайным образом, независимо от равновесного размера пузырька, в диапазоне значений от 0 до 0.038 Н/м с арифметическим средним 0.0133 Н/м, тогда как λ_{s1} и η_s продемонстрировали явное увеличение с возрастанием равновесного радиуса пузырька. Полиномиальная аппроксимация полученных в результате подгонки значений λ_{s1} и η_s дает следующие соотношения, описывающие зависимость λ_{s1} и η_s от равновесного радиуса (или равновесного объема $V_{b0} = (4\pi/3)R_{20}^3$) инкапсулированного пузырька:

$$\lambda_{s1} = 0.0125 + 0.0024R_{20}^3 = 0.0125 + 0.00057V_{b0}, \quad (51)$$

$$\eta_s = 1.25 + 0.14R_{20}^3 = 1.25 + 0.033V_{b0}, \quad (52)$$

где единицы измерения R_{20} , λ_{s1} и η_s есть соответственно микроны, микросекунды и Па·с.

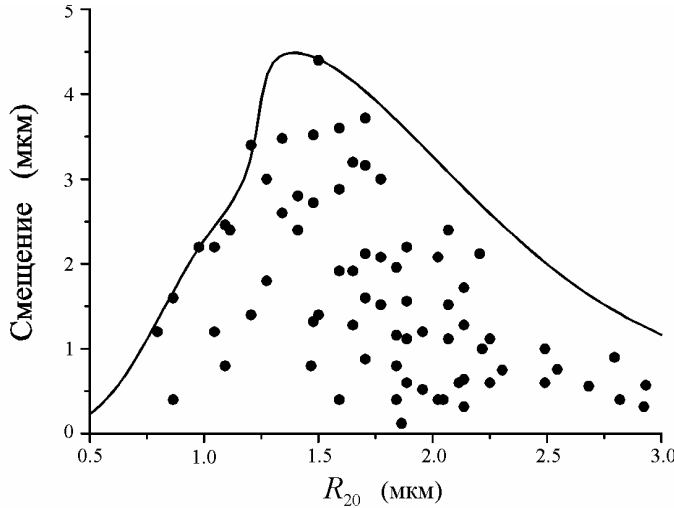


Рис. 5. Экспериментальные и теоретические значения трансляционного смещения для липидного контрастного агента МР 1950

Уравнения (51) и (52), с $\sigma_2 = 0.0133$ Н/м, были использованы для моделирования трансляционного смещения липидных контрастных агентов. Полученные результаты показаны на рис. 5. Экспериментальные значения трансляционного смещения, взятые из работы [26], показаны кружками. Теоретическое сме-

шение показано сплошной линией. Нетрудно видеть, что экспериментальные и теоретические значения находятся в удовлетворительном соответствии, что говорит об адекватности разработанной модели. Теоретическая кривая имеет вид огибающей по отношению к экспериментальным данным. Это объясняется следующими причинами. Теоретические расчеты основываются на предположении, что пузырьки находятся в неограниченной среде, тогда как экспериментальные измерения были сделаны для пузырьков, движущихся через 200-микронную трубку, стенки которой приводят к возникновению дополнительной силы вязкого сопротивления, замедляющей движение пузырьков. В результате теоретические значения трансляционного смещения выглядят несколько завышенными по отношению к экспериментальным данным.

Литература

1. Применение ультразвука в медицине: Физические основы. 1989.
2. Nyborg W. L. // Encyclopedia of Applied Physics. 1991. Vol. 2. P. 403.
3. Wells P. N. T. // Rep. Prog. Phys. 1999. Vol. 62. P. 671.
4. Goldberg B. B., Raichlen J. S., Forsberg F. Ultrasound Contrast Agents: Basic Principles and Clinical Applications. 2001.
5. Coakley W. T., Nyborg W. L. // Ultrasound: Its Applications in Medicine and Biology. 1978. Part I, Chap. 2.
6. Becher H., Burns P.N. Handbook of Contrast Echocardiography. 2000.
7. Forsberg F. et al. // J. Ultrasound Med. 1995. Vol. 14. P. 949.
8. Ferrara K.W. et al. // Acad. Radiol. 2001. Vol. 7. P. 824.
9. Postert T., Muhs A. et al. // Stroke 1998. Vol. 29. P. 1901.
10. Lindner J. R. // Am. J. Cardiol. 2002. Vol. 90. P. 72J.
11. Dayton P. A., Ferrara K. W. // J. Magn. Reson. Im. 2002. Vol. 16. P. 362.
12. Forsberg F., Goldberg B. B., Merton D. A. // Radiology. 1999. Vol. 210. P. 125.
13. Lindner J. R., Song J. et al. // Circulation. 2000. Vol. 102. P. 2745.
14. Frizzell L. A. Ultrasound: its chemical, physical, and biological effects. 1988. P. 287.
15. Dalecki D., Child S. Z. et al. // Ultrasound Med. Biol. 1997. Vol. 23. P. 1435.
16. De Jong N., Cornet R., Lancee C.T. // Ultrasonics 1994. Vol. 32. P. 447.
17. Church C. C. // J. Acoust. Soc. Am. 1995. Vol. 97. P. 1510.
18. Frinking P. J. A., de Jong N. // Ultrasound Med. Biol. 1998. Vol. 24. P. 523.
19. Hoff L., Sontum P. C., Hovem J. M. // J. Acoust. Soc. Am. 2000. Vol. 107. P. 2272.
20. Sboros V., MacDonald C. A. et al. // Ultrasonics. 2002. Vol. 40. P. 579.
21. Morgan K. E. et al. // IEEE Trans. UFFC. 2000. Vol. 47. P. 1494 .
22. Bird R. B., Armstrong R. C., Hassager O. Dynamics of Polymeric Liquids. 1987.
23. Doinikov A. A. // Phys. Fluids. 2005. Vol. 17. 128101. P. 1.
24. Doinikov A. A. // Far East J. Appl. Math. 2006. Vol. 25. P. 159.
25. Doinikov A. A., Dayton P. A. // J. Acoust. Soc. Am. 2006. Vol. 120. P. 661.
26. Dayton P. A., Allen J. S., Ferrara K. W. // J. Acoust. Soc. Am. 2002. Vol. 112. P. 2183.
27. Bloch S. H., Wan M. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 84. P. 631.
28. Borden M. A. Longo M. L. // Langmuir. 2002. Vol. 18. P. 9225.
29. Kim D. H., Costello M. J. et al. // Langmuir. Vol. 19. P. 8455.
30. Borden M. A., Pu G., Runner G. J., Longo M. L. // Colloids and Surfaces. 2004. Vol. B 35. P. 209.
31. Borden M. A. et al. // Langmuir. 2006. Vol. 22. P. 4291.

32. *Doinikov A. A., Teterev A. V.* // Proc. of the 13th Int. Congress on Sound and Vibration (ICSV13). 2006. ISBN: 3-95-01554-5-7.
33. *Doinikov A. A.* Bubble and Particle Dynamics in Acoustic Fields: Modern Trends and Applications. Kerala. Research Signpost. 2005. P. 95.
34. *Marmottant P. et al.* // J. Acoust. Soc. Am. 2005. Vol. 118. P. 3499.

SPATIO-TEMPORAL DYNAMICS OF MICROBUBBLE CONTRAST AGENTS IN ULTRASOUND FIELDS

A. A. Doinikov

Theoretical models have been developed that govern the oscillation and translation dynamics of ultrasound contrast agent microbubbles with encapsulating shells of albumin, polymer, and lipid. The model for albumin- and polymer-shelled contrast agents is based on the assumption that the rheological behavior of such shells can be described by a viscoelastic solid following the Kelvin-Voigt constitutive equation. The model for lipid-shelled contrast agents treats the lipid shell as a viscoelastic fluid following the linear 3-constant Oldroyd equation. The proposed models allow one to trace by numerical simulation the radial and translational motions of contrast agent microbubbles in an ultrasound field. The ability of the developed models to predict the spatio-temporal dynamics of currently available contrast agents has been examined. To estimate the values of the shell parameters appearing in the model for lipid-shelled bubbles, theoretical radius-time curves were fitted by the least squares method to experimental data available in the literature. It has been found that the relaxation time and the shear viscosity of lipid monolayer shells are dependent on the equilibrium radius of the bubble, with increasing values for increasing equilibrium radii. The regression relationships representing the best-fit values of the shell parameters as a function of equilibrium bubble radius were obtained. The relationships were then used to simulate the translational motion of lipid-shelled microbubbles of various radii. Theoretical translational displacement was compared to experimentally measured displacement for lipid-shelled contrast agents. It has been shown that the developed model for lipid-coated contrast agents provides satisfactory agreement with the experimental measurements.

PROTEIN CHEMICAL LIGATION AS AN INVALUABLE TOOL FOR STRUCTURAL NMR

A. Shekhtman*

1. Introduction

Structural analysis of proteins and their complexes comes to the forefront of the efforts to gain comprehensive knowledge of biological processes within the cell [1–3]. Protein NMR spectroscopy becomes the technique of choice for structural characterization of proteins and their complexes when the molecular weight does not exceed approximately 30 kDa [4, 5]. Though X-ray crystallography remains the gold standard for high-resolution determination of protein structures, the availability of NMR analysis expands the repertoire of structural biology to include flexible and otherwise non-crystallizable structural targets, such as multi-domain systems where separate domains are connected by flexible linkers [6–8]. The ability of NMR spectroscopy to characterize the dynamics of these systems on multiple timescales at atomic resolution is unique among spectroscopic methods and can provide necessary insights into the biological function of the corresponding molecules [4, 9].

The barrier for the application of NMR spectroscopy to characterize larger protein targets is the increased spectral complexity of these large proteins and to the significant line-width broadening associated with unfavorable relaxation properties. At the same time, there is a strong need to have a technique which adequately describes the molecular interactions of modular proteins consisting of multi-domain structures. Structural analysis of separate domains from these systems may not be adequate due to the inter-domain and intra-molecular regulatory interactions. Multi-domain proteins created through genetic shuttling are very common, especially, in eukaryotic systems [10]. Usually, the molecular weight of a single protein domain is about 10 kDa [7]. Thus, multi-domain proteins are difficult NMR targets due to their increasingly large molecular weight. Newly developed NMR techniques based on transverse relaxation optimized (TROSY) methodology significantly alleviates problems related to the increased line-width of the NMR signals and makes it possible to work with proteins and protein complexes of molecular weights beyond 100 kDa [11].

Although observable, NMR signals from the large proteins exhibit extreme spectral overlap, which cannot be resolved even in three- or four-dimensional NMR spectra [12]. The way to decrease structural complexity is to use samples where only few amino acids are labeled with NMR active nuclei, thus, editing out signals from the rest of the molecule [13]. Though powerful, this approach is limited because of the semi-uniform distribution of specific amino acids within the primary structure of proteins, which leads to the inability to obtain sequence specific information without highly non-trivial resonance assignments.

Expressed protein ligation presents a very valuable addition to the existing repertoire of protein over-expression technologies for NMR sample preparation [14–16].

* The State University of New York at Albany, USA.

It allows one to isotopically label part of the full-length protein leaving the rest of the protein cryptic. This approach dramatically decreases the spectral complexity of the NMR data since isotope edited NMR experiments leave only resonances originating from the isotopically labeled segment of the protein. Segmental labeling can be used both to expand structural NMR characterization of the proteins to much larger sizes and to obtain highly specific information about protein structure using the labeled segment as a chemical probe. Segmental labeling has successfully been used to study by NMR diverse modular systems such as the SH3-SH2 domains from abl kinase [17], the bacterial σ^A factor [18] and the Gyrase intein system [19].

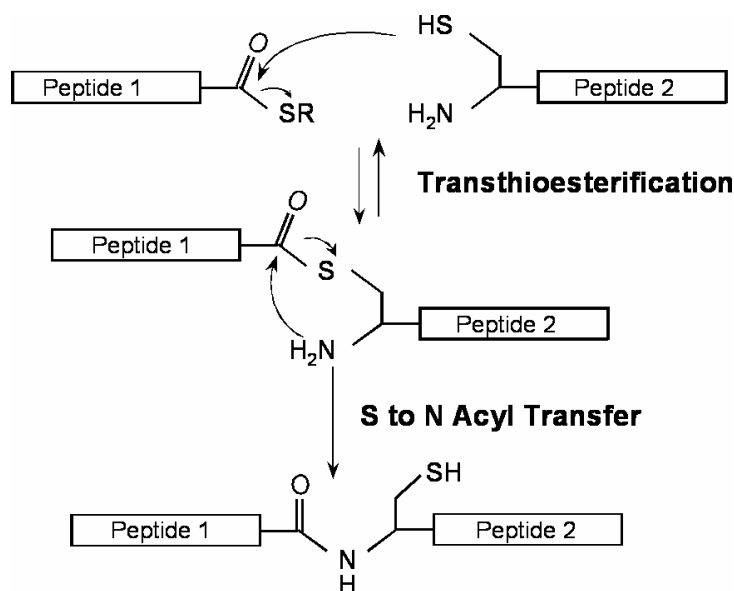


Fig. 1. General mechanism of protein chemical ligation

2. Method

The general methodology of expressed protein ligation is based on the reaction between the C-terminal thioester of the N-terminal segment of the protein and the N-terminal cysteine residue of the C-terminal segment [20, 21] (Fig. 1). The critical issue for the sample construction is the position of the ligation site, which is usually chosen in a loop region not involved in the biological activity of the protein. This minimizes the introduction of any possible structural change at the ligation site and, more importantly, reduces the possibility to affect the biological function of the protein. The reaction is mild enough to be performed under native conditions when one or both precursor fragments are folded [15]. The C-terminal α -thioester can be produced using either solid phase peptide synthesis or bacterially over-expressed protein-intein fusion precursor with subsequent intein cleavage [16].

The total synthesis of peptides is well developed and provides essentially complete control over the regio- and stereospecific placement of isotopic labels within the peptidic structure. It is essential to use this method if information about selected bonds in a full-length protein is needed. It works well when the synthetic product does not exceed about 3 kDa. The economies and time-scales of such synthesis essentially preclude routine use of this technique for synthesis of larger peptidic fragments.

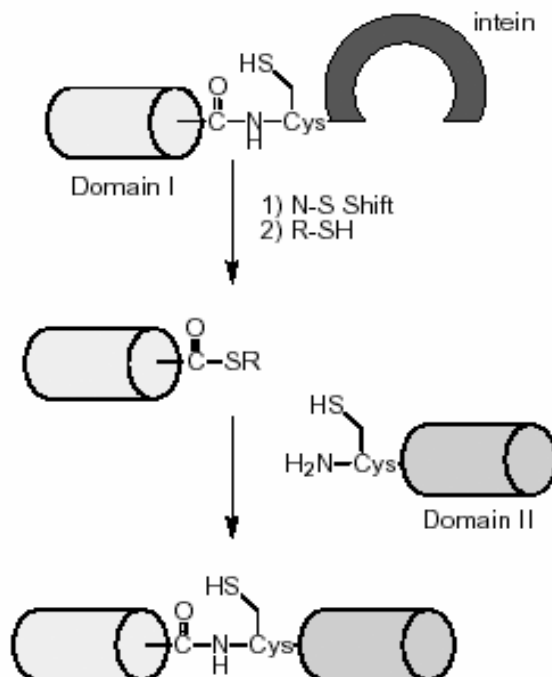


Fig. 2. General mechanism of expressed protein ligation using intein fusion construct

The intein-based technique to generate polypeptide C-terminal α -thioesters was proposed and shown to work on various systems [16]. It is based on genetically engineered inteins to release the N-terminal extein of the N-extein-intein fusion with a C-terminal α -thioester group. The intein cleavage reaction is very robust and is accomplished using thiol containing compounds, such as ethanethiol and 2-mercaptoethanesulfonic acid (MESNA).

The N-terminal cysteine-containing fragment of the ligation reaction (Fig. 2) can be created using either factor Xa protease to release the final product from a specific fusion system or mutated inteins which release the N-terminal cysteine segment. Both methods are proven to be effective and can be interchangeably used to generate the desired product [15].

Either one or two domains of the full-length proteins can be separately labeled with an NMR active nuclei using EPL. The general issues of isotopic labeling for NMR are well known. Molecular size consideration dictates extensive use of deuteration to alleviate line broadening associated with proton-proton relaxation in large molecular systems. The reduced proton (REDPRO) approach [22] of isotopic labeling provides a useful trade-off between the need for proton density to obtain structural information using NMR and requirement of isolated protons to eliminate proton-proton relaxation. The REDPRO procedure has the potential for applications which include structural determination, mapping of chemical shift changes, and for the study of higher molecular weight cases.

3. Applications

Expressed protein ligation has been successfully used to characterize diverse multi-domain systems such as the abl SH32 dual domain system [17] and bacterial sigma factor [18] using NMR spectroscopy. A semi-synthetic approach to EPL was also used to characterize an unusual scissile bond between the N-extein and intein [19].

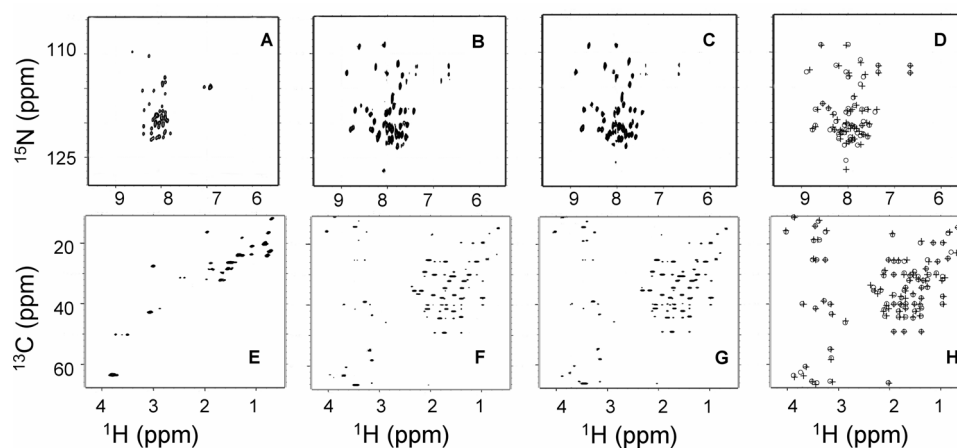


Fig. 3. Effect of the molecular context on the solution structure of bacterial sigma factor region 4.2. (A-C) $^1\text{H}\{^{15}\text{N}\}$ HSQC-TROSY spectra of isolated region 4.2 (A), region 4.2 in the context of full-length bacterial sigma factor (B), region 4.2 in the context of bacterial sigma factor without region 1.1 (C); (E-G) $^1\text{H}\{^{13}\text{C}\}$ HSQC spectra of isolated region 4.2 (E), region 4.2 in the context of full-length bacterial sigma factor (F), region 4.2 in the context of bacterial sigma factor without region 1.1 (G); (D and H) Comparison of the reconstructed $^1\text{H}\{^{15}\text{N}\}$ HSQC-TROSY and $^1\text{H}\{^{13}\text{C}\}$ HSQC spectra of the truncated bacterial sigma factor (circles) and full-length bacterial sigma factor (crosses), using chemical shifts extracted from individual spectra (B, C and F,G)

Bacterial sigma-factor binds to the RNA polymerase to form a holoenzyme competent for DNA transcription [23]. RNA polymerase itself does not bind to the promoter DNA region and completely relies on sigma-factor for DNA recognition. Para-

doxically, sigma-factor alone does not bind to DNA due to autoinhibition [24]. It was shown that the small acidic N-terminal domain Region 1.1 regulates binding of the C-terminal Region 4.2 of sigma factor to the DNA promoter region. It was hypothesized that Region 1.1 obstructs the DNA binding surface of region 4.2, thus preventing its interaction with DNA [25]. Using EPL segmental labeling, two constructs were created [18]. One construct was a full-length sigma factor with REDPRO labeled domain 4.2 and domains 1 through 4.1 unlabeled. The second construct was truncated form of sigma factor consisting of unlabeled domains 1.2 through 4.1 and REDPRO labeled 4.2. NMR spectra of the backbone amide protons and side-chains showed no significant change in chemical shifts between the two constructs (Fig. 3). Due to the exquisite sensitivity of the NMR chemical shift to the changes in the chemical environment, it was concluded that there is no direct interaction between domains 1.1 and 4.2. A new model of indirect, electrostatic interaction between domains 1.1 and 4.2 was proposed. Essentially, this study used segmental labeling to create a sequence specific probe of the tertiary structure of the protein without absolute need for laborious NMR resonance assignments. Semi-synthesis of a segmental isotopically labeled protein and NMR was used to decipher the mechanism of intein splicing autocatalysis [19].

The critical issue of the intein splicing reaction is the conformation of the scissile protein bond between the N-extein and the intein. Crystallographic studies found significant conformational heterogeneity in the scissile (-1) peptide bond ranging from normal *trans* [26, 27], distorted *trans* [28] and *cis* [29] conformation. NMR chemical shifts and the scalar coupling constant $^1J_{NC}$ are exquisitely sensitive to peptide bond conformation [30] and have been used to probe the conformation of the scissile (-1) peptide bond in the small intein *Mxe* GyrA. A N-extein containing a ^{13}C labeled C-terminal carbonyl was synthesized using Boc-SPPS [31]. It was chemically ligated to the [U- ^{15}N] wild type intein, *Mxe* GyrA as well as the [U- ^{15}N] inactive mutant GyrA(H75A), thus, creating a unique ^{13}C - ^{15}N bond between the extein and intein. Using isotope edited NMR experiments [32], the scalar coupling constant $^1J_{NC}$ of the labeled scissile bond was extracted from wild type and mutant GyrA. The significant difference in the coupling constant between the wild type N-extein-GyrA and inactive mutant N-extein-GyrA(H75A) suggests a distorted *trans* bond at the extein-intein junction existing in solution. Since twisted amide bonds are known to be significantly more susceptible to alkaline hydrolysis, this study supports the “ground-state destabilization” model as a part of the mechanism of autocatalysis [19].

4. Conclusions

Expressed protein ligation provides a unique opportunity to obtain structural high-resolution information about chemically defined segments of large proteins and protein complexes using NMR spectroscopy. It complements recently developed transverse relaxation optimized (TROSY) based NMR techniques to provide NMR windows into molecular masses of 100 kDa and more. Combination of semisynthesis and expressed protein ligation creates new possibilities of analyzing unusual electron configurations within full-length proteins using NMR observables.

References

1. *Burley S. K., Bonanno J. B.* // *Methods Biochem. Anal.* 2003. Vol. 44. P. 591.
2. *Christendat D., Yee A.* et al. // *Prog. Biophys. Mol. Biol.* 2000. Vol. 73. P. 339.
3. *Koonin E. V., Wolf Y. I., Karev G. P.* // *Nature.* 2002. Vol. 420. P. 218.
4. *Cavanagh J., Fairbrother W. J.* et al. // *Protein NMR Spectroscopy: Principles and practice.* San Diego, 1996. P. 1.
5. *Montelione G. T., Zheng D.* et al. // *Nat. Struct. Biol.* 2000. Vol. 7. P. 982.
6. *Bax A., Kontaxis G., Tjandra N.* // *Methods Enzymol.* 2001. Vol. 339. P. 127.
7. *Cowburn D.* // *J. of Cellular Biochemistry.* 1995. P. 24.
8. *Fushman D., Cowburn D.* // *Biological Magnetic Resonance.* New York. 2003. P. 20, 53.
9. *Palmer A. G., Grey M. J., Wang C.* // *Methods Enzymol.* 2004.
10. *Gerstein M., Lin J., Hegyi H.* // *Pac. Symp. Biocomput.* 2000. P. 30.
11. *Riek R., Pervushin K., Wuthrich K.* // *Trends Biochem. Sci.* 2000. Vol. 25. P. 462.
12. *Salzmann M., Pervushin K.* et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 1998. Vol. 95. P. 13585.
13. *Matthews S.* // *Methods Mol. Biol.* 2004. Vol. 278. P. 35.
14. *Cowburn D., Muir T. W.* // *Nuclear Magnetic Resonance of Biological Macromolecules.* 2001. Vol. 339. P. 41.
15. *Cowburn D., Shekhtman A.* et al. // *Methods Mol. Biol.* 2004. Vol. 278. P. 47.
16. *Muir T. W.* // *Annu. Rev. Biochem.* 2003. Vol. 72. P. 249.
17. *Xu R., Ayers B., Cowburn D., Muir T. W.* // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 1999. Vol. 96. P. 388.
18. *Camarero J. A., Shekhtman A.* et al. // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 2002. Vol. 99. P. 8536.
19. *Romanelli A., Shekhtman A.* et al. // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 2004. Vol. 101. P. 6397.
20. *Dawson P. E., Kent S. B.* // *Annu. Rev. Biochem.* 2000. Vol. 69. P. 923.
21. *Dawson P. E., Muir T. W.* et al. // *Science.* 1994. Vol. 266. P. 776.
22. *Shekhtman A., Ghose R.* et al. // *FEBS Lett.* 2002. Vol. 524. P. 177.
23. *Severinova E., Severinov K.* et al. // *J. Mol. Biol.* 1996. Vol. 263. P. 637.
24. *Gross C. A., Chan C.* et al. // *Cold Spring Harb Symp. Quant. Biol.* 1998. Vol. 63. P. 141.
25. *Dombroski A. J., Walter W. A., Gross C. A.* // *Genes Dev.* 1993. Vol. 7. P. 2446.
26. *Ding Y., Xu M. Q., Ghosh I.* et al. // *J. Biol. Chem.* 2003. Vol. 278. P. 39133.
27. *Mizutani R., Nogami S.* et al. // *J. Mol. Biol.* 2002. Vol. 316. P. 919.
28. *Poland B. W., Xu M. Q., Quijcho F. A.* // *J. Biol. Chem.* 2000. Vol. 275. P. 16408.
29. *Klabunde T., Sharma S.* et al. // *Nat. Struct. Biol.* 1998. Vol. 5. P. 31.
30. *Juranic N., Moncrieffe M. C.* et al. // *J. Am. Chem. Soc.* 2002. Vol. 124. P. 14221.
31. *Schnolzer M., Alewood P.* et al. // *Int. J. Pept. Protein Res.* 1992. Vol. 40. P. 180.
32. *Konrat R., Muhandiram D. R.* et al. // *J. Biomol. NMR.* 1997. Vol. 9. P. 409.

БЕЛКОВОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ СТРУКТУРНОГО ЯМР

А. Шехтман

В работе сделан обзор последних приложений метода белкового легирования для ЯМР исследований структуры протеинов и протеиновых комплексов. Эта уникальная методология позволяет создавать химерные белки, которые имеют определенные химические сегменты, помеченные ЯМР активными ядрами (^{15}N и ^{13}C), оставляющие без изменений белковые свойства. Этот метод приводит к существенному сокращению спектральной сложности ЯМР и открывает новые возможности для анализа структур и структурных взаимодействий очень больших (>100 к а. е. м.) биологических молекул и биологических механизмов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ДОЗОВЫХ НАГРУЗОК НА ОРГАНЫ И ТКАНИ ПАЦИЕНТА ВО ВРЕМЯ РЕНТГЕНОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

С. А. Кутень, А. А. Хрущинский, В. Ф. Миненко*, Т. С. Кухта*

В настоящее время широкое применение для целей дозиметрии рентгенологических исследований в медицине приобрели численные методы расчета переноса ионизирующего излучения, в частности метод Монте-Карло [1]. Это было обусловлено бурным развитием вычислительной техники и созданием весьма эффективных программных продуктов, таких как EGS [2], MCNP [3] и MCNPX [4]. Для работы названных программных продуктов требуются такие исходные данные для расчета дозы в теле человека, как модель объекта облучения и модель источника рентгеновского излучения.

Настоящая работа посвящена моделированию источника рентгеновского излучения и созданию программы оценки дозы облучения различных органов во время типичных рентгенологических исследований (требуемый для таких исследований энергетический диапазон лежит выше 40 кэВ и не охватывает маммографию).

Анализ вопросов, связанных с разработкой эффективной модели спектра рентгеновской трубки для дозовых вычислений, показал, что проблему вычисления дозовых нагрузок на все тело человека и его отдельные органы во время радиологических процедур целесообразно решать в два этапа. На первом этапе рассчитывается распределение дозы для моноэнергетического источника гамма-квантов. На втором этапе проводится свертка моноэнергетического отклика со спектром излучения реального рентгеновского источника. Это разбиение обусловлено исключительно сложностью разработки эффективной модели рентгеновской трубки, справедливой для широкой области изменения более чем десятка параметров, описывающих различные режимы работы рентгеновских аппаратов разного типа.

Таким образом, на первом этапе для заданных геометрических параметров рентгенологической процедуры (расстояние источник-поверхность объекта облучения (РИП), пол облучения, координаты центрации пучка, угол проекции и наклон в вертикальной плоскости, размер фокуса) рассчитываются дозовые распределения $D(r, E)$ для любой выбранной точки r облучаемого объекта при фиксированной энергии источника гамма-квантов E . Предполагается, что испускаемые источником гамма-кванты равномерно распределены по фокусному пятну трубки.

На этапе разработки, в качестве объекта облучения был взят антропоморфный физический фантом типа Алдерсона – Рендо. Фантом просканировали на компьютерном томографе с целью получения его томографических изображений. Томограммы были затем использованы для создания воксельной модели фантома. Дальнейшая работа проводилась с использованием разработанной воксель-

* ГУО БелМАПО, Минск.

ной модели фантома. Соответствующая система координат, принятая при описании фантома Алдерсона – Рендо, показана на рис. 1. Один из вариантов базовой координатной сетки для вычисления объемных дозовых распределений в воксельной модели фантома типа Алдерсона – Рендо (приведен на рис. 2 для сечения $z = 46$ см, соответствующего разрезу на уровне легких). Точками обозначены места локализации детекторов определенного типа. В задаче оценки поглощенной дозы различными тканями при рентгенографических исследованиях разумно выбрать в качестве элементарного детектора точечный детектор MCNP с неаналоговым ускорением набора необходимой статистики. В указанном слое размещено 108 точечных детекторов MCNP.

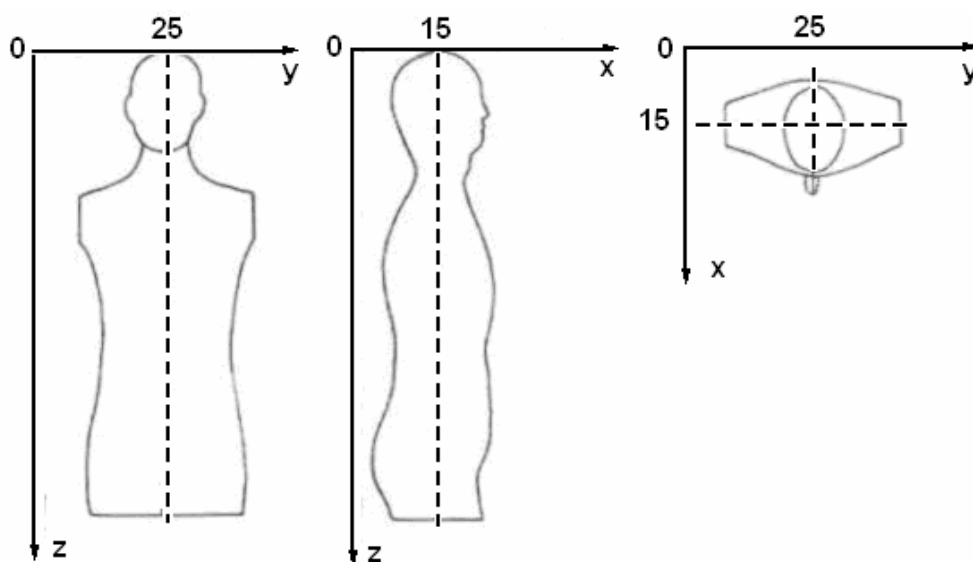


Рис. 1. Система координат для фантома Алдерсона – Рендо

Дискретный шаг в пространстве определяется схемой размещения точечных детекторов MCNP в облучаемом теле.

Выбор шага дискретизации энергетической области определяется спектром рентгеновской трубки, который зависит от анодного напряжения. Этот шаг должен быть подобран таким образом, чтобы воспроизводились все особенности спектра рентгеновской трубки, в частности пики характеристического рентгеновского излучения. Это означает, что для практических целей дискретный шаг в энергетической области должен быть неравномерным – сравнительно большим в области вне пиков характеристического излучения и достаточно мелким в области этих пиков. Окончательный результат для пространственного распределения поглощенной дозы в фантоме будет являться интегральной сверткой моноэнергетического отклика $D(\vec{r}, E)$ с энергетическим спектром $G_0(E)$ рентгеновской установки в ее фокусе:

$$D(\vec{r}) = \int D(\vec{r}, E) G_0(E) dE. \quad (1)$$

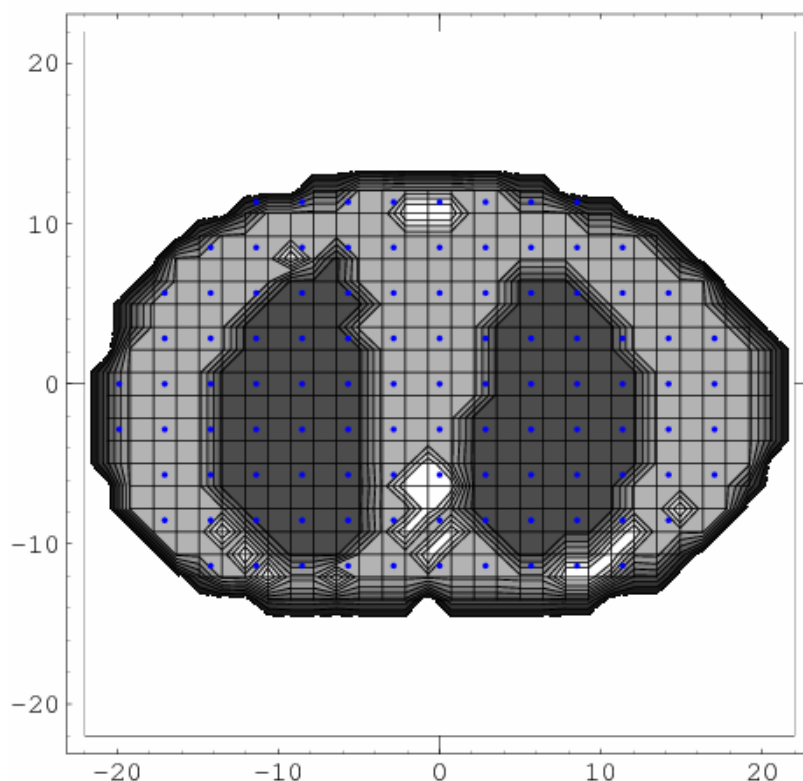


Рис. 2. Один из вариантов базовой координатной сетки для вычисления объемных дозовых распределений в фантоме Алдерсона – Рендо $z = 46$ см (108 точечных детекторов MCNP в слое)

Фактически, в связи с использованием воксельного фантома, дозовые распределения $D(r, E)$ должны быть рассчитаны для сетки точечных детекторов MCNP для параллелепипеда, разбитого на множество объемных вокселей. Пространственное распределение $D(r, E)$ затем используется для расчета соответствующей дозы в выделенном органе.

Несмотря на то что формула (1) в принципе решает задачу вычисления поглощенной дозы в органе от любого источника рентгеновского излучения путем разбиения ее на две части: вычисление дозы от моноэнергетического источника и последующую ее свертку с выбранным модельным спектром рентгеновского аппарата, она оказалась практически неприменимой по техническим причинам. К сожалению, на компьютере с частотой процессора 3 ГГц расчет дозового распределения $D(r, E)$ для моноэнергетического источника с энергией E для одной проекции облучения при фиксированных остальных параметрах длится семь дней. Поэтому в связи с практической невозможностью проведения расчетов с моноэнергетическим источником основное внимание было уделено разработке эффективной модели рентгеновского источника.

1. Физико-математическая модель рентгеновского источника для моделирования работы рентгеновской трубки с учетом ее характеристик

Для моделирования работы рентгеновской трубки с учетом ее характеристик нами была использована «TASMP»-модель рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом, работающей в диапазоне анодных напряжений 30–140 кВ [5]. Наше описание рентгеновского аппарата, основанное на «TASMP»-модель рентгеновской трубки, в настоящий момент включает следующие параметры:

напряжение на аноде;

- размер и форма фокусного пятна;
- расстояние «источник – поверхность фантома» (РИП);
- поле облучения;
- толщина основного и дополнительного фильтров;
- пульсация анодного напряжения (риплл);
- ток в цепи катод – анод;
- расстояние «источник – формирующее устройство»;
- характеристики формирующего устройства;
- «TASMP»-модель рентгеновской трубки.

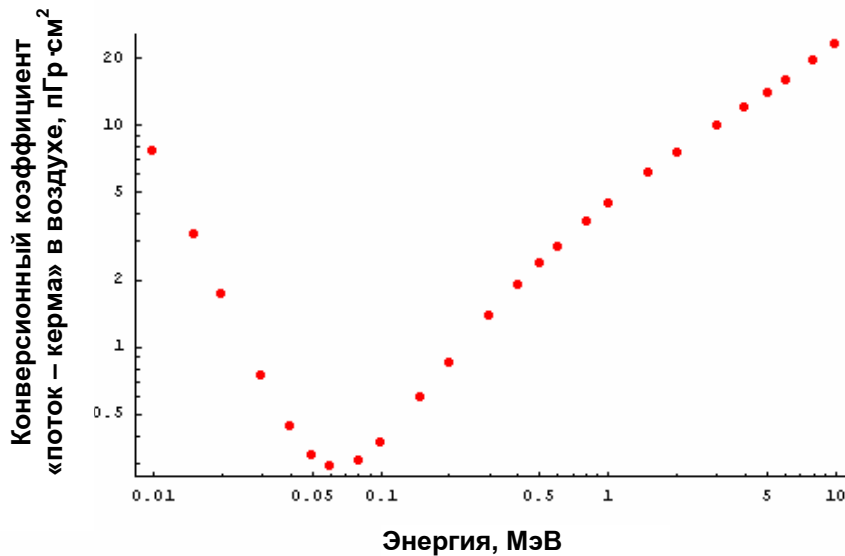


Рис. 3. Энергетическая зависимость конверсионного коэффициента «поток – керма» $F(E)$ в воздухе [2]

Проведена верификация модели рентгеновской трубки путем оценки интенсивности потока излучения и путем расчета дозы. Верификация интенсивности излучения основана на сравнении экспозиционной дозы, создаваемой модельным источником на расстоянии R в воздухе, и измеренной в этой точке аналогичной экспериментальной величиной.

Любой модельный источник рентгеновского излучения оперирует с величиной, близкой к потоку квантов, которую необходимо конвертировать в дозовую величину типа керма. Энергетическая зависимость конверсионного коэффициента «поток – керма» для фотонов в воздухе, взятая из работы [6] (см. рис. 3), проинтерполирована аналитической функцией $F(E)$ ($\text{пГр} \cdot \text{см}^2$), используемой далее как при верификации интенсивности рентгеновского источника, так и при дозовых расчетах в воздухе.

В модели «TASMIP» число фотонов, испускаемых источником в энергетическом интервале $(E, E+dE)$, $dE = 1 \text{ кэВ}$ за 1 с на расстоянии $R_0 = 100 \text{ см}$ от фокуса, приходящихся на 1 мм^2 площади и на 1 мА анодного тока при заданном напряжении V и его пульсации (ripple) ζ , дается табулированной функцией $I_0(V, \zeta, E, d)$ (фотон/ $(\text{мАс} \cdot \text{кэВ} \cdot \text{мм}^2)$) для заданного фильтра (эквивалентная толщина $d \text{ мм}$ алюминия). Для примера на рис. 4 приведен спектр рентгеновской трубки в «TASMIP»-модели для параметров трубки $V = 120 \text{ кВ}$, $\zeta = 0$ в отсутствие фильтра и с типичным фильтром 2.5 мм Al . Пики на рис. 4 соответствуют К-линиям характеристического рентгеновского излучения вольфрамового анода. Мягкое характеристическое рентгеновское излучение L-линий в области $8\text{--}11 \text{ кэВ}$ для целей рентгеновской диагностики несущественно и не рассматривается в рамках «TASMIP»-модели.

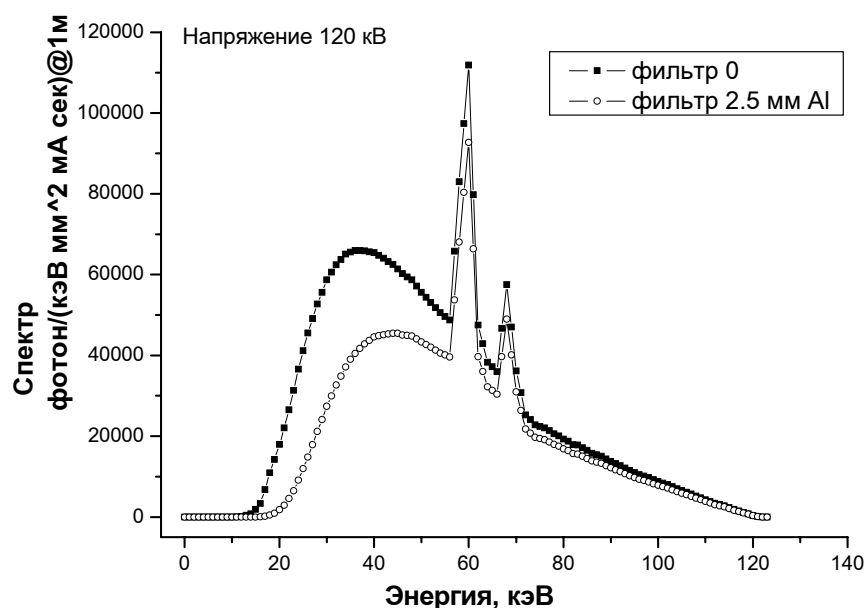


Рис. 4. Энергетический спектр рентгеновской трубки в «TASMIP»-модели для параметров трубки $V=120 \text{ кВ}$, $\zeta=0$, в отсутствие фильтра $d=0$ и с фильтром $d=2.5 \text{ мм Al}$

Интегрируя эту функцию источника, фактически являющейся плотностью потока фотонов на расстоянии R_0 от фокуса трубки, с зависящим от энергии конверсионным коэффициентом $F(E)$, мы получим керму в воздухе. Окончательное выражение зависит от выбора единиц измерения кермы. Если ее измерять в мГр, то величина кермы, даваемая «TASMIP» источником на расстоянии R от фокуса и приходящаяся на 1 мАс, будет определяться выражением:

$$K'(V, \zeta, d)(\text{мГр} / \text{мАс}) = 10^{-4} \frac{R_0^2}{R^2} \int_{E_1}^{E_2} I_0(V, \zeta, E, d) F(E) dE, \quad (2)$$

где числовые множители обусловлены согласованием единиц измерения конверсионного коэффициента «поток – керма» и потока в «TASMIP»-модели. E_1 и E_2 – начальная и граничная энергии спектра рентгеновского источника. Первая из них определяется фильтрами аппарата, вторая – анодным напряжением.

Ради краткости назовем величину $K'(V, \zeta, d)(\text{мГр}/\text{мАс})$ «удельной» кермой. Зависимость «удельной» кермы от анодного напряжения в модели «TASMIP» имеет параболический характер и приведена на рис. 5 для различной фильтрации на расстоянии 1 м от фокуса в отсутствие пульсации напряжения $\zeta = 0$.

Этому теоретическому значению «удельной» кермы в воздухе может быть поставлен в соответствие аналогичный параметр $K(\mu)$, извлекаемый из экспериментальной зависимости кермы от величины произведения тока трубки на длительность экспозиции в мАс, μ , измеряемой на расстоянии R от фокуса. Как правило, для нормально функционирующих рентгеновских трубок эта зависимость

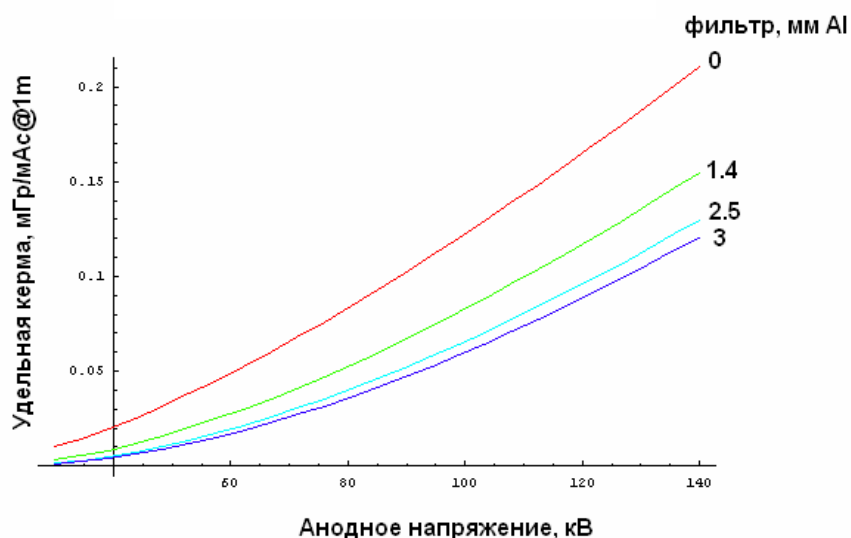


Рис. 5. Зависимость «удельной» кермы (мГр/мАс) от анодного напряжения в модели «TASMIP» при различной фильтрации (нулевой риппл $\zeta=0$)

очень слабо отличается от линейной, и функция $K(\mu)$ может быть аппроксимирована первыми двумя членами своего разложения в ряд Тейлора:

$$K(\mu) = K_0 + K'(0)\mu + 1/2 K''(0)\mu^2, \quad (3)$$

где K_0 – некоторая постоянная, характеризующая трубку. Пример такой экспериментальной зависимости $K(\mu)$ приведен на рис. 6 для рентгеновского аппарата Mevasim при анодном напряжении 85 кВ (РИП = 100 см, поле облучения 5 см × 5 см). Здесь же представлен результат сглаживания (фитирования) ее параболой:

$$K(x) = -0.0158 + 0.0375x - 8.6556 \cdot 10^{-7} x^2.$$

Нелинейность параметра $K(\mu)$, определяемая вторым членом (3), чрезвычайно мала.

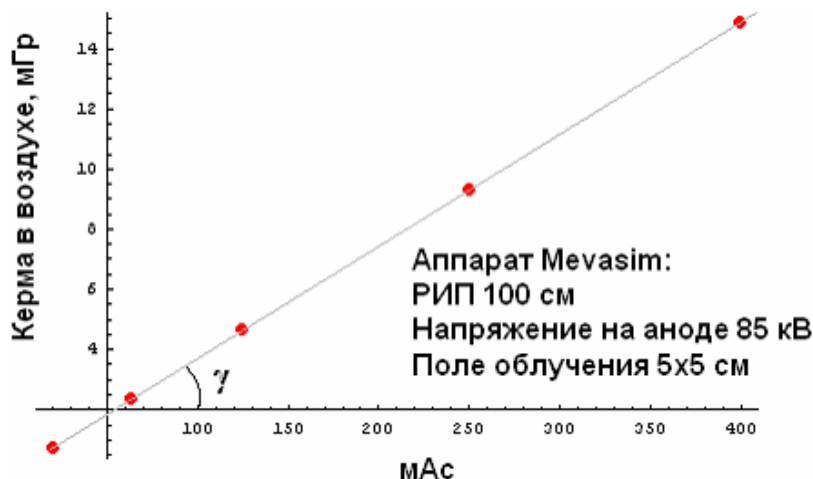


Рис. 6. Экспериментальная зависимость «воздушная керма – МАс» для рентгеновского аппарата Mevasim

При корректном описании работы рентгеновской трубки модельным источником «TASMIP» величина $K'(V, \zeta, d)$ (1) должна совпадать с производной $K'(0) = \left. \frac{dK}{d\mu} \right|_{\mu=0}$ или с тангенсом угла $tg\gamma$ наклона экспериментальной характеристики $K(\mu)$:

$$K'(V, \zeta, d) = tg\gamma = K'(0) \quad (4)$$

Одна из верификаций интенсивности в модели «TASMIP» рентгеновской трубки основана на проверке равенства (4) для различных режимов работы трубки.

Следует отметить, что хорошо себя зарекомендовавшая для дозиметрических расчетов полуэмпирическая модель «TASMIP» рентгеновской трубки основана на анализе экспериментальных данных для конкретной рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом [5].

2. О влиянии пульсаций анодного напряжения

Пульсации анодного напряжения (или риппл) количественно характеризуются риппл-фактором (RF) вида:

$$RF = \frac{V_{\max} - V_{\min}}{V_{\max}} 100 \%, \quad (5)$$

где $V_{\max}$ и $V_{\min}$ – максимальное и минимальное значение анодного напряжения соответственно.

Самый значительный эффект от наличия пульсаций напряжения, типичные значения которого составляют $RF \sim 5 - 10 \%$ [7], по-видимому, все же заключается не в энергетическом перераспределении поглощения излучения в фантоме, а в относительном уменьшении радиационного выхода источника при наличии риппла. Это видно из рис. 7, где приведены спектры «TASMIP»-источника в отсутствие и при наличии риппла для напряжения 80 кВ при отсутствии фильтрации и для типичного фильтра 2.5 мм. Наличие риппла практически не изменяет положение максимума спектра, но заметно уменьшает его амплитуду, и как следствие, интенсивность излучения, в грубом приближении пропорциональную площади под спектром. Количественно уменьшение площади под спектром зависит от фильтрации.

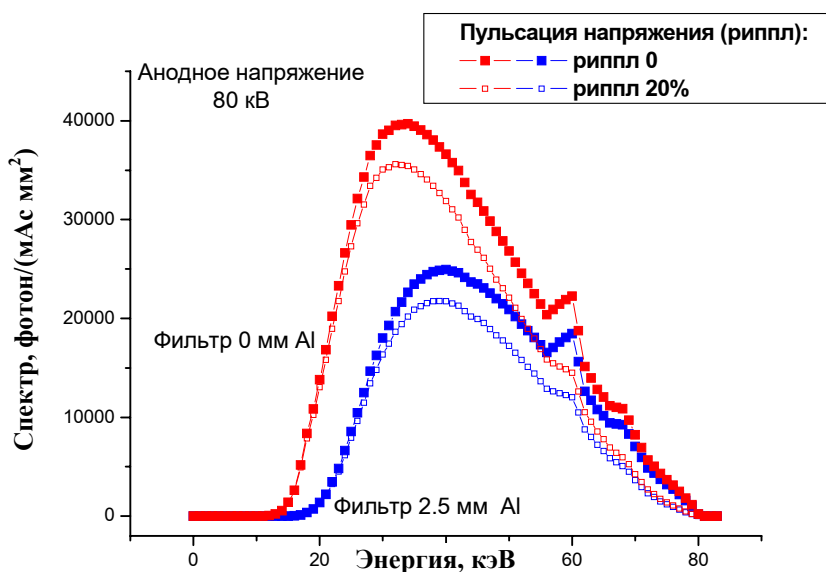


Рис. 7. Влияние риппла на форму спектра излучения для «TASMIP»-источника (анодное напряжение 80 кВ)

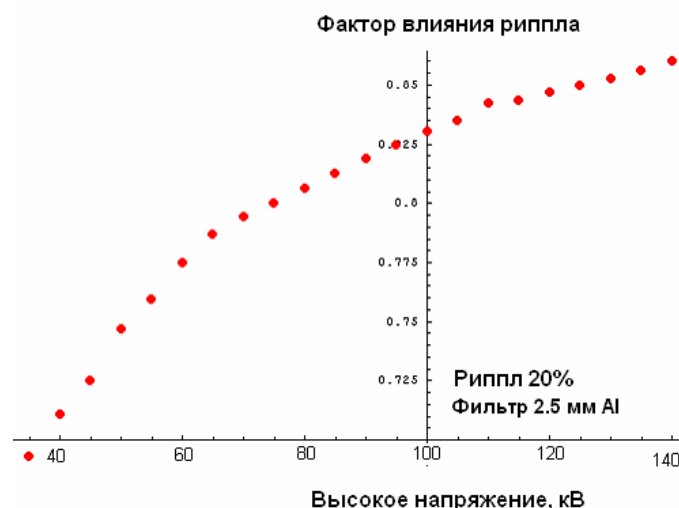


Рис. 8. Фактор влияния риппла в зависимости от напряжения для «TASMIP»-источника рентгеновского излучения

В первом приближении, считая радиационный выход пропорциональным площади под спектром, можно дать оценку относительного уменьшения радиационного выхода источника из-за риппла. Такие данные приведены в табл. 1 при риппле 20 % (высокое напряжение 80 кВ) для разной фильтрации.

Таблица 1

Оценка относительного уменьшения радиационного выхода источника из-за наличия риппла для типичного анодного напряжения 80 кВ

Фильтрация, мм Al	0	2.5	4	6
Относительное уменьшение радиационного выхода источника при риппле 20 % (высокое напряжение 80 кВ)	16.7 %	19.3 %	20.5 %	21.9 %

Вводя фактор влияния риппла как отношение площадей под спектром при наличии и в отсутствие риппла, можно получить зависимость влияния риппла от напряжения. Для типичного фильтра 2.5 мм Al такая зависимость приведена на рис. 8 для «TASMIP»-источника при риппле 20 %.

В целом в первом приближении можно считать, что риппл сводится к уменьшению радиационного выхода на 20–30 %. Более точные оценки для изменения радиационного выхода требуют, как было показано выше, привлечения энергетической зависимости конверсионного коэффициента «поток – керма» $F(E)$ в воздухе.

3. Результаты верификации в модели «TASMIP» для различных типов рентгеновских трубок

Существуют различные способы верификации моделей рентгеновского излучателя: керма в воздухе – сравнение теории и эксперимента, расчет F6 функционала в воздухе в рамках MCNP, слой половинного ослабления – сравнение

теории и эксперимента, расчет F5 функционала MCNP для продольного и поперечного распределения поглощенной дозы в водном и тканеэквивалентном фантомах. Результаты верификации интенсивности в модели «TASMIP» для аппарата Mevasim приведены на рис. 9, где показана зависимость удельной воздушной кермы (мГр/мАс) от анодного напряжения. Для удобства приведен также ряд теоретических кривых $K'(V, \zeta, d)(1)$ при различной фильтрации. Напомним, что в соответствии с документацией полный внутренний фильтр аппарата Mevasim соответствует эффективной толщине 2.5 мм Al. Следует отметить, что существует известное смешение понятий при определении точного значения толщины эквивалентного алюминиевого фильтра для конкретной установки. Часто используемые термины «основной» фильтр и «дополнительный» в русско-язычном варианте не совсем соответствуют английским терминам inherent and additional filters. На рис. 9 видно, что если предположить, что установка Mevasim характеризуется суммарным фильтром 3 мм Al, то в целом наблюдается хорошее согласие между рассчитанной и экспериментально измеренной удельной воздушной кермы для разных напряжений. С ростом напряжения различие между ними слегка увеличивается.

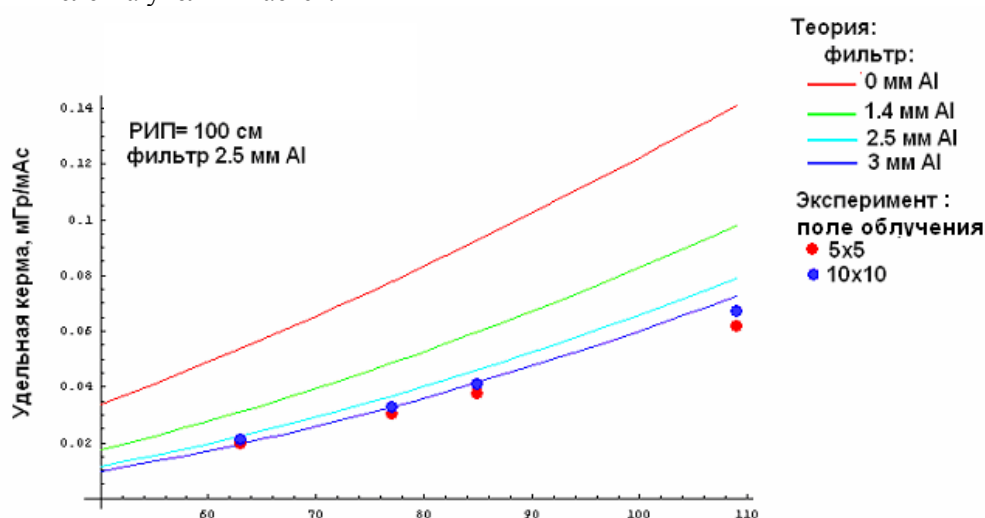


Рис. 9. Сравнение теоретической и экспериментальной зависимости удельной воздушной кермы от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Приведенная интерпретация показывает реальную возможность коррекции модели рентгеновского источника с целью соответствия ее предсказаний экспериментальным данным конкретной установки. Другая интерпретация этих данных, на наш взгляд, более соответствующая действительности, состоит в том, что мы имеем конкретное различие в предсказанной и измеренной удельной керме, вызванное разными причинами. Отношения теоретически рассчитанной и экспериментально измеренной удельной воздушной кермы для разных напряжений и полей облучения систематизированы в табл. 2 и показаны для удобства на рис. 10 (отношение «теория/эксперимент» ТЕ).

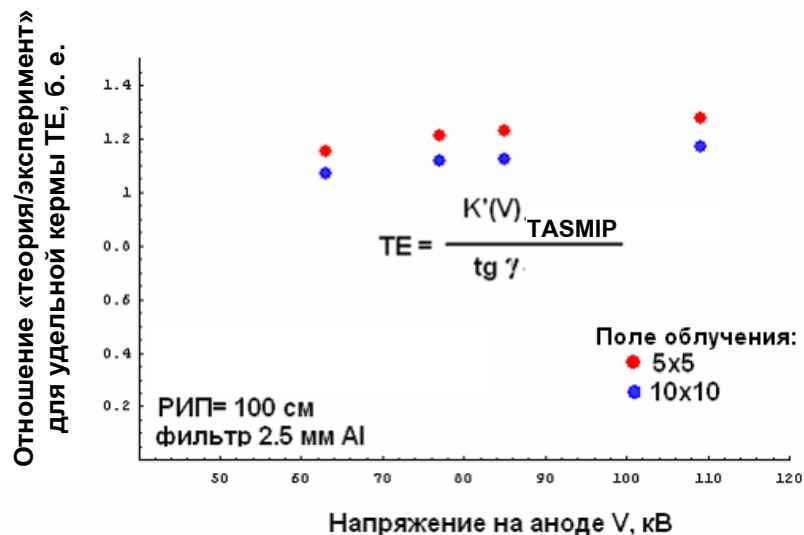


Рис. 10. Отношение «теория/эксперимент» для удельной воздушной кермы (мГр/мАс) для рентгеновского аппарата при различных анодных напряжениях и полях облучения (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Обратим внимание, что в соответствии с рис. 9, 10, измеренная в воздухе керма на расстоянии РИП = 1 м от источника зависит от поля облучения, хотя такой зависимости в модели «TASMIP» не предусматривается. Физически керма в воздухе определяется только расстоянием до источника и не может зависеть от поля облучения, что и содержится в модели «TASMIP». Однако измерения кермы проводятся на рентгеновской установке с формирующим устройством на некотором расстоянии от него. В этом случае вклад в показания будут давать процессы рассеяния излучения на формирующем устройстве и воздухе.

Таблица 2

Отношение «теория/эксперимент» TE для удельной воздушной кермы (мГр/мАс) для рентгеновского аппарата при различных анодных напряжениях и полях облучения (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Напряжение на аноде, кВ	Отношение «теория/эксперимент» TE , б. е. $TE = K'(V)_{TASMIP} / \text{tg}(\gamma)$			
	63	77	85	109
Поле облучения 5×5 см	1.153	1.214	1.230	1.279
Поле облучения 10×10 см	1.072	1.117	1.126	1.174

Для характеристики эффекта поля облучения при измерении кермы в воздухе на рентгеновском аппарате введем количественный показатель F_{field} – фактор поля облучения, равный относительной разности удельной воздушной кермы для двух полей облучения:

$$F_{field} = \frac{\text{tg}(\gamma_1) - \text{tg}(\gamma_2)}{\text{tg}(\gamma_1)}, \quad (6)$$

где $\gamma_{1,2}$ – угол наклона характеристики «керма – мАс» для двух полей облучения 1 и 2 соответственно.

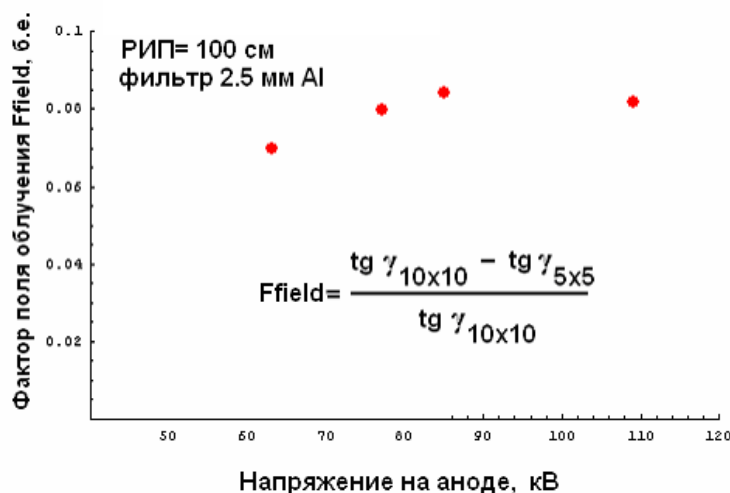


Рис. 11. Зависимость фактора поля облучения для удельной воздушной кермы от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Зависимость фактора поля облучения F_{field} от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al) приведена на рис. 11. В среднем он составляет 7–9 % в области напряжений 63–110 кВ. По-видимому, величина F_{field} обусловлена в большей степени процессами рассеяния квантов в воздухе, чем процессами рассеяния их в Pb диафрагме.

Действительно, типичная толщина диафрагмы формирующего устройства составляет порядка 1 мм Pb, что составляет свыше 5 длин свободного пробега фотона в Pb для энергии кванта 63 кэВ. По этой причине рассеяние излучения как таковое сильно подавлено в Pb диафрагме. В то же время длина свободного пробега фотона в воздухе составляет 185 см для энергии 63 кэВ. В этом случае при расстоянии 1 м от источника до детектора (ионизационная камера) процессы рассеяния квантов в воздухе будут давать вклад в показание детектора. Чем больше поле облучения, тем больше воздуха вовлекается в процессы рассеяния, тем больше керма, показываемая прибором. Такое поведение кермы, измеренной в воздухе на рентгеновском аппарате, согласуется с рис. 9–11.

4. О модификации «TASMP»-модели для описания рентгеновских трубок с W-Re анодом

Иллюстративные материалы (см. табл. 2 и рис. 10) свидетельствуют о возрастании отношения «теория/эксперимент» TE для удельной воздушной кермы с ростом напряжения с 15 % при низких напряжениях (63 кВ) до 28 % при высоких напряжениях (109 кВ), причем величина TE больше единицы. Такое расхождение может быть лишь частично компенсировано за счет изменения толщины

фильтра (см. рис. 9). Даже если компенсировать величину TE изменением фильтра на низких энергиях, расхождение останется порядка 10 %. Такое расхождение может быть обусловлено естественными причинами: «TASMIP»-модель описывает спектр рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом, в то время как анод в аппарате Mevasim сделан из сплава вольфрама с рением с примесью молибдена и графита. Типичное массовое отношение рения к вольфраму есть 0.1 (оно практически фиксировано, т. к. диктуется различными техническими причинами). Поскольку заряды W и Re практически одинаковы, тормозное излучение, создаваемое 10 % сплавом вольфрама с рением, будет таким же, как и создаваемое 100 % вольфрамом. В то же время амплитуда характеристического излучения, создаваемого 10 % сплавом вольфрама с рением, будет на 10 % меньше амплитуды характеристического излучения от 100 % вольфрама (характеристическое излучение молибдена лежит в низкоэнергетичной области спектра и не представляет интереса для диагностических рентгенологических обследований). По этой причине, чтобы «TASMIP»-модель описывала рентгеновскую трубку с W-Re анодом, амплитуду всех линий характеристического излучения (линии W) в «TASMIP»-модели необходимо уменьшить на 10 %.

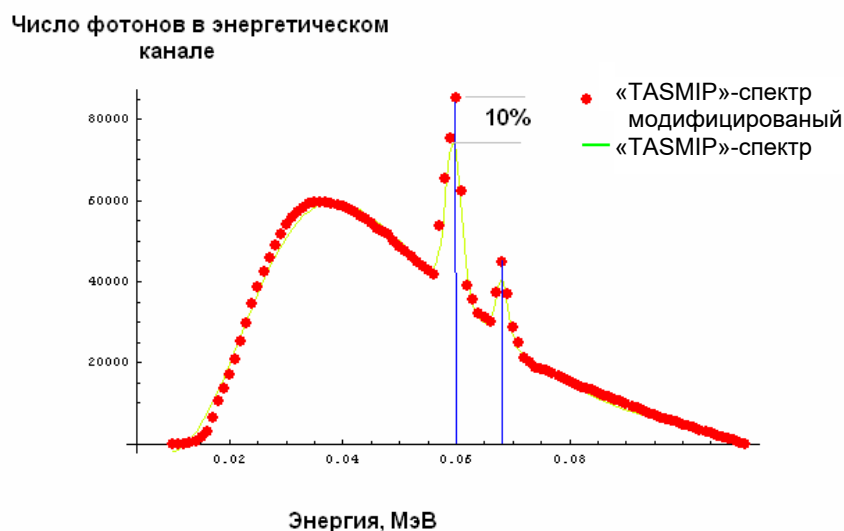


Рис. 12. Модификация «TASMIP»-модели для рентгеновской трубки с W-Re анодом

Пример такой модификации спектра «TASMIP»-источника показан на рис. 12 для напряжения 109 кВ. Для этого форма спектра представлялась в аналитическом виде посредством фитирования его с помощью двух гауссианов, описывающих характеристическое излучение вольфрама, и подставки типа импульса с затянутым задним фронтом. Последний может быть описан различными математическими полиномиальными представлениями. В данном случае подставка хорошо описывается логнормальным распределением. В модифицированном спектре амплитуды обоих пиков уменьшены на 10 %.

Для отработки вопросов, связанных с верификацией модели рентгеновской трубки при расчетах глубинных распределений поглощенной дозы в водном и тканеэквивалентных фантомах, разработана программа автоматической генерации входного файла в коде MCNP. В коде MCNP проведены вычисления мощности поглощенной дозы на глубинах 2, 5, 10, 15, 22, 26 см в водном фантоме при различных напряжениях на аноде и различных полях облучения с точностью от 0.5 % до 2.5 %. Сравнение экспериментального значения мощности поглощенной дозы, создаваемой рентгеновской трубкой OPTILIX в водном фантоме, с расчетной величиной, основанной на «TASMIP»-модели рентгеновской трубки, показывает их совпадение на глубине 10 см в пределах ошибки измерений для всего диапазона анодных напряжений 63–109 кВ (диапазон имеющихся измерений).

Сравнение как удельной кермы в воздухе, так и глубинных распределений мощности поглощенной дозы в водном фантоме, даваемых другими типами рентгеновских трубок, требует отдельного обсуждения. В целом соответствующие расчеты выполнены для трех типов рентгеновских трубок.

5. Определение доз облучения в органах

В принципиальном плане определение дозовых нагрузок на орган не сильно отличается от определения его объема. Схематично объем в одном слое определяется характерным сечением в данном слое и высотой слоя. При расчете площади контура, используя метод накопленной фазы, суммируются все центры прямоугольников внутри контура. Суммирование прямоугольников (их центров) происходит с единичным весом (все прямоугольники эквивалентны между собой). При расчете дозовой нагрузки на какой-либо слой органа, указанные прямоугольники должны суммироваться с весом, равным значению дозы в данной точке (центр прямоугольника), полученной в результате MCNP вычислений с решеткой точечных детекторов. В общем случае шаг на сетке прямоугольников не обязан совпадать с шагом решетки точечных детекторов (шаг MCNP вычислений). В таком случае мы будем вынуждены проводить интерполяцию MCNP результатов, чтобы получить их величины в центрах прямоугольников. В первом приближении в качестве шага на сетке прямоугольников можно использовать шаг MCNP решетки. Тогда подсчитывая точки внутри контура с соответствующими весами, получим дозовую нагрузку на данный слой органа. Суммируя их по слоям с соответствующим элементарным объемом (элементарный объем в MCNP решетке), получим дозу на орган размерности доза $\times$ объем. В итоге, разделив полученную величину на объем органа, получим среднюю дозовую нагрузку на орган.

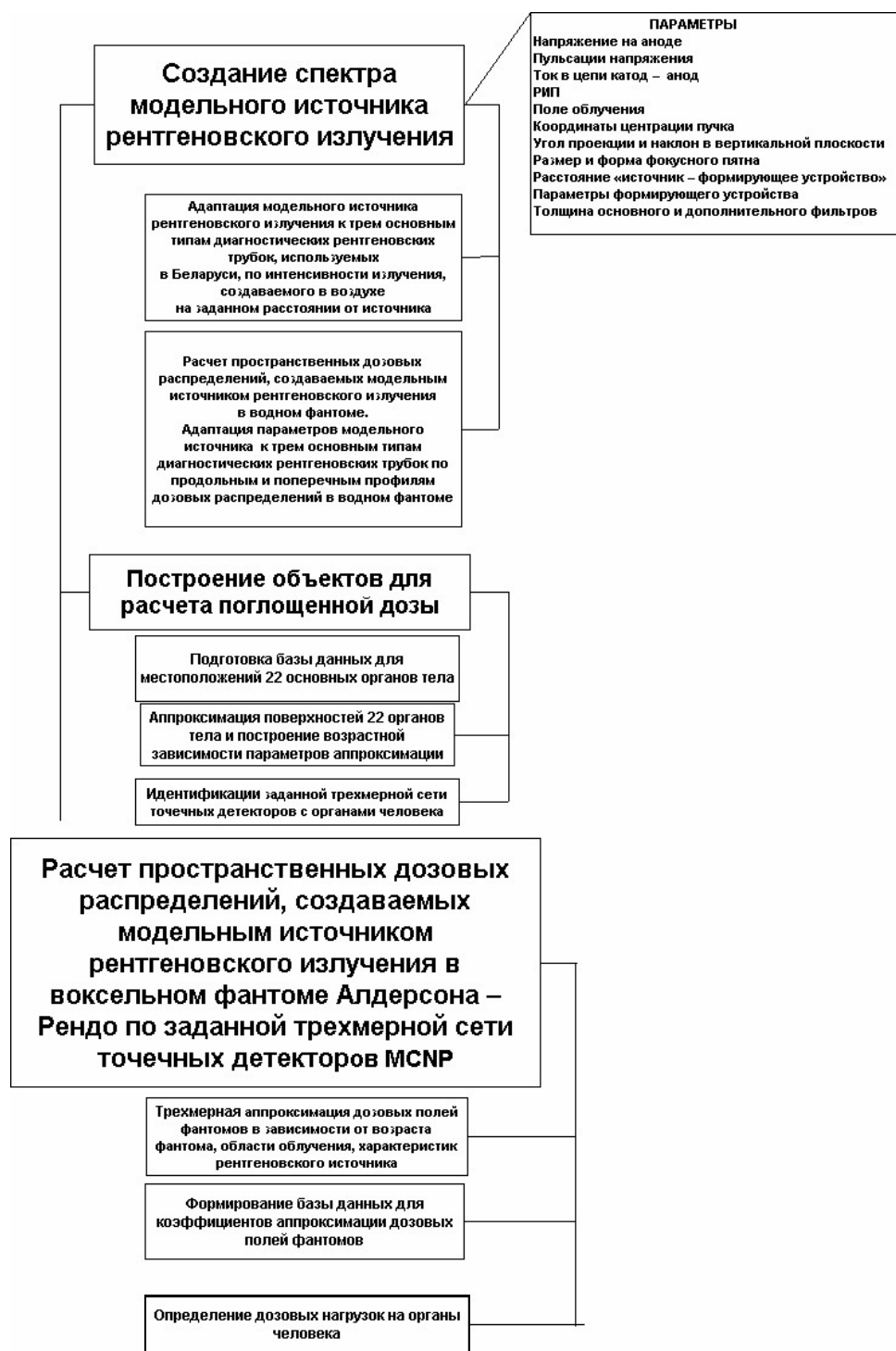


Рис. 13. Блок-схема алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента

Оказалось, что такая процедура эффективно работает для больших органов, в отдельный слой которого попадает хотя бы одна точка MCNP решетки. Для малых органов типа тимуса, сам орган целиком лежит внутри одной полосы MCNP решетки, т. е. в него не попадает ни одна точка из этой решетки. В этом случае отыскиваются ближайшие к центру органа (или центру его ветви, если орган в слое состоит из нескольких ветвей как для тимуса или щитовидной железы) в данном слое MCNP результаты и производится их двумерная интерполяция на центр ветви или центр органа. Основанием для элемента объема в этом случае служит площадь контура ветви или органа.

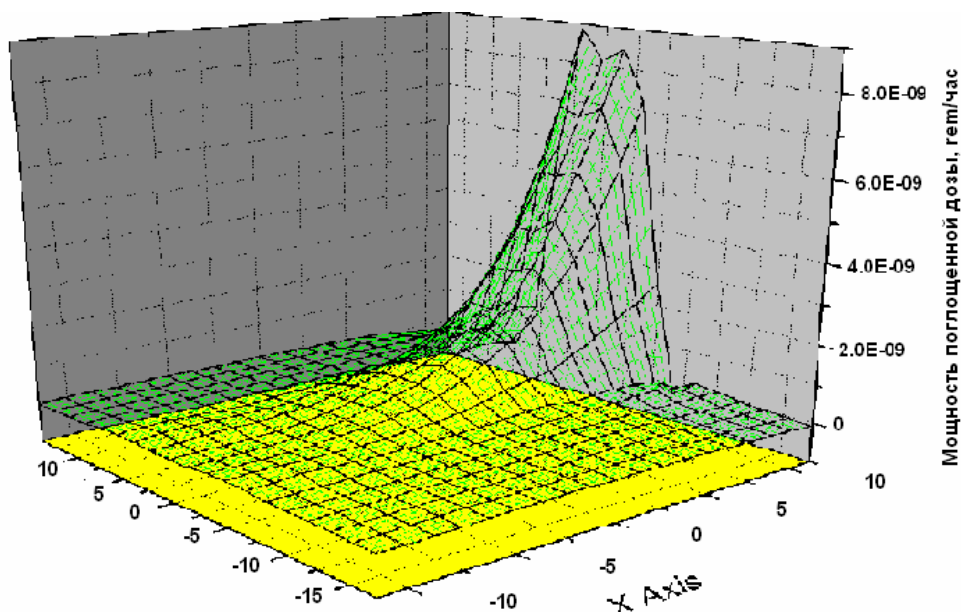


Рис. 14. Распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в слое $z = 46$ см в фантоме Алдерсона – Рендо для «TASMIP»-модели рентгеновской трубки (РИП 75 см, напряжение 109 кВ, поле облучения 10×10 см, фильтр 2.5 мм Al)

6. Алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения

Изложенное выше составляет основу алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения. Обобщенная блок-схема алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента с учетом параметров источника приведена на рис. 13. В соответствии с вышесказанным алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента состоит из трех основных блоков:

- создание спектра модельного источника рентгеновского излучения;
- построение объектов для расчета поглощенной дозы;

- расчет пространственных дозовых распределений, создаваемых модельного источника рентгеновского излучения в воксельном фантоме Алдерсона – Рендо по заданной трехмерной сети точечных детекторов MCNP;
- блок непосредственного расчета дозовых нагрузок на органы.

На рисунках 14 и 15 приведено распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в показанном на рис. 1 слое $z = 46$ см фантома Алдерсона – Рендо для «TASMIP»-модели рентгеновской трубки, выполненное посредством Монте-Карло моделирования процессов переноса излучения в фантоме.

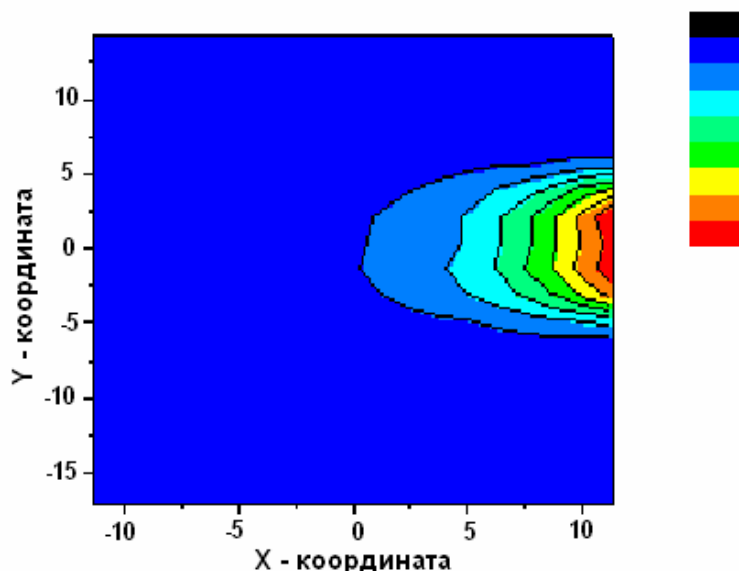


Рис. 15. Контурное распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в слое $z = 46$ см в фантоме Алдерсона – Рендо для «TASMIP»-модели рентгеновской трубки (РИП 75 см, напряжение 109 кВ, поле облучения 10×10 см, фильтр 2.5 мм Al)

7. Определение дозовых нагрузок на пациентов с различными физиологическими данными

Изменение алгоритма и соответствующих программ для пациентов различного возраста производится в соответствии с методикой [8, 9]. Исходный фантом Алдерсона – Рендо с критическими органами преобразуется новый фантом в зависимости от роста и веса пациента с новыми размерами по методике [8, 9].

В соответствии с [8, 9], в работе используется соотношение между весом и ростом пациента и размером области таза, талии и торса пациента, характерное для жителей Беларуси. Аналитически коррекция стандартного фантома производится методом подбора линейной зависимости размеров тела от веса и роста. Преобразование контуров тела и органов в зависимости от веса и роста производится в следующей последовательности:

1) пропорциональное увеличение (уменьшение) расстояния между слоями;
 2) вычисление на основе линейной зависимости стандартного веса от роста определяются весовая категория пациента (избыточный вес, стандарт, недостаточный вес);

3) для стандартного пациента производится послойная коррекция тела и органов пропорционально отклонению роста от стандарта;

4) для пациента с избыточным весом производится дополнительная коррекция контура тела с использованием уравнений регрессии, определяющих зависимость увеличения размеров торса, талии и таза в зависимости от избыточного веса. Внутренние органы в этом случае дополнительно не корректируются, предполагая, что увеличение размеров тела и веса происходит за счет жировой ткани;

5) для пациента с недостаточным весом производится одновременная коррекция контуров тела и внутренних органов по аналогичной зависимости;

6) зависимость размеров тела от веса и роста используется отдельно для мужчины и женщины;

7) область бюста и таза в базовом фантоме различны для мужчины и женщины.

Вышеописанные изменения для пациента с другими, нежели у стандартного фантома Алдерсона – Рендо, характеристиками требуют перестройки самого воксельного фантома и соответственно новой решетки MCNP детекторов. Хотя алгоритм и реализован в программе Mathematica, соответствующие MCNP расчеты не проводились по причине их исключительной трудоемкости даже для стандартного фантома.

8. Тестирование и верификация разработанного программного пакета

Верификация разработанного программного пакета проводилась двумя путями. Было проведено сравнение результатов расчета по известной российско-финской программе «Оргдоза» [10] доз на внутренние органы при рентгенологическом исследовании органов брюшной полости и результатов расчета для тех же условий облучения с помощью нашего пакета. Полученные результаты показаны для сравнения в табл. 3.

Таблица 3

Результаты расчета доз облучения внутренних органов при рентгенологическом исследовании брюшной полости

Орган	Поглощенная доза, мГр			
	Оргдоза		Собственные вычисления	
	Проекция ПЗ	Проекция Б	Проекция ПЗ	Проекция Б
Желудок	0.025	0.018	0.025	0.022
Печень	0.019	0.0053	0.021	0.0037
Пищевод	0.00033	0.00026	0.0043	0.0032
Надпочечники	0.0085	0.0097	0.0076	0.0057
Почки	0.0033	0.01	0.0042	0.012
Поджелудочная железа	0.015	0.016	0.013	0.026
Селезенка	0.0064	0.02	0.0065	0.021
Желчный пузырь	–	–	0.058	0.0053

Полученные результаты показывают хорошее совпадение результатов собственных расчетов с результатами известного программного продукта «Оргдоза». Наблюдаемые несущественные различия скорее всего связаны с различиями в оценках объема облучаемой ткани, а не с описанием модели источника излучения.

Следующий путь верификации состоял в сравнении результатов измерений дозы в органах на физическом фантоме типа Алдерсона – Рендо с результатами оценки доз с помощью разработанного программного пакета. Для сравнения был взят вариант облучения органов брюшной полости в прямой передне-задней проекции. Измерения проводили на рентгеновском аппарате «SIREGRAPH CF». Условия проведения измерений были следующие: анодное напряжение – 70 кВ, произведение тока трубки на экспозицию – 0.9 мАс, фильтр 2.5 мм Al, расстояние источник – поверхность фантома 100 см, размеры поля облучения на поверхности фантома 30 × 24 см, центр поля облучения на 60 см от «макушки» фантома.

В качестве дозиметров были использованы термolumинесцентные детекторы ДТУ-01. Погрешность измерения в диапазоне доз 0.1–10 мГр равна ±30 %. В табл. 4 показаны результаты измерений дозы в отдельных органах и результаты расчета.

Таблица 4

Результаты измерения и расчета поглощенной дозы в отдельных органах

Орган	№ слоя	№ точки	Поглощенная доза, мГр	
			измерения	расчет
Желудок	24	169	0.12	0.138
Поджелудочная железа	22	13	0.6	0.459
Легкое правое	18	87	0.07	0.077
Сердце	18	х	менее 0.1	0.047

В пределах погрешностей измерения дозы с помощью ТЛ дозиметров наблюдается полное совпадение результатов расчета с данными прямых измерений в антропоморфном фантоме взрослого человека типа Алдерсона – Рендо.

9. Заключение

Представленный в данной работе алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения для пациентов разного возраста для основных видов рентгенологических исследований реализован в виде пакета компьютерных программ вычисления доз облучения в органах и тканях для пациентов разного возраста и пола для основных видов рентгенологических исследований. Весь программный пакет можно представить в виде трех частей: первая из них в коде Mathematica модифицирует стандартный воксельный фантом Алдерсона – Рендо взрослого человека с учетом возрастных и других особенностей пациента и создает входной файл для MCNP кода расчета поглощенной дозы на решетке точечных детекторов MCNP. Необходимый для входного файла спектр излучения рентгеновского источника предоставляется второй частью программного пакета. Запуск входного файла осуществляется под управлением специального Perl-скрипта.

В третьей части программного пакета происходит построение математических образов органов стандартного фантома Алдерсона – Рендо взрослого человека, а также их необходимая коррекция с учетом возрастных и других особенностей пациента. Здесь также происходит расчет дозовых нагрузок на органы, используя результаты MCNP вычислений.

Выполнены расчеты дозовых распределений и определены дозовые нагрузки на органы для стандартного фантома Алдерсона – Рендо взрослого человека для 25 типичных рентгенологических исследований.

Тестирование и верификация разработанного программного пакета позволяют рекомендовать его для широкого применения в рентгенодиагностических кабинетах учреждений здравоохранения.

Литература

1. Ay M., Shahriari M. et al. // Phys. Med. Biol. 2004. Vol. 49. P. 4897.
2. Nelson W.R., Hirayama H., Rogers W. O. The EGS Code System. Stanford Linear Accelerator Centre report SLAC-265. 1985.
3. MCNPXTM – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C, LA-13709-M. April 2000.
4. MCNPXTM User's Manual, Version 2.4.0, LA-CP-02-408. September 2002.
5. Boone J. M., Seibert J. A. // Med. Phys. 1997. Vol. 24. P. 1661.
6. International Commission on Radiological Protection. ICRP-23: Reference man: anatomical, physiological and metabolic characteristics.
7. Ay M.R., Shahriari M. et al. // Phys. Med. Biol. 2004. Vol. 49. P. 4897.
8. Servomaa A., Ranniko S. et al. A topographically and anatomically unified phantom model for organ dose determination in radiation hygiene. STUK A87. 1989.
9. Ranniko S., Ermakov I. et al. // The British J. Radiology. 1997. Vol. 70. P.708.
10. Программный продукт «Расчет эффективных доз и доз на органы пациента за счет рентгенодиагностических процедур «ОРГДОЗА» /ЦНИРРИ МЗ РФ. СПб., 1997.

IMPLEMENTAION OF MONTE CARLO SIMULATIONS FOR ASSESSMENT OF DOSE BURDENS ON THE TISSUES AND ORGANS OF PATIENTS DURING DIAGNOSTIC X-RAY INVESTIGATIONS

S. A. Kutsen, A. A. Khrutchinsky, V. F. Minenko*, T. S. Kuhta*

A voxel model of anthropomorphic tissue-equivalent Rando-like physical phantom has been developed from its CT-scan images for Monte Carlo simulations of transport of Roentgen radiation emitted by typical X-ray apparatus. Apparatus models based on TASMIP model for X-ray tube spectrum are verified using measurements of kerma-in-air and in-depth absorbed dose distribution for physical phantom with three commonly used in Belarus X-ray apparatus. X-ray source model includes an anode high voltage, anode current, voltage ripple, focus, filtration, distance “source – surface”, forming device characteristics, irradiation field, X-ray beam position as well as irradiation projection and inclination in a vertical plane.

The package of computer programs of calculation of dose burdens on the tissues and organs of the patients of different age has been developed for the basic types of diagnostic x-ray investigations using preliminary Monte Carlo simulations of transport of X-ray through the voxel model of the patient.

* Belarusian Medical Academy of Postgraduate Education, Minsk, Belarus.

КОНЦЕПЦИЯ, ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТЫ СОЗДАВАЕМОЙ СЕТИ КОМПЬЮТЕРНОГО ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА НАСЕЛЕНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ В ПОСТЧЕРНОБЫЛЬСКИЙ ПЕРИОД

В. И. Иванов, А. Н. Лазарчик

Экологическая ситуация на большей части территории Республики Беларусь в постчернобыльский период характеризуется наличием низкодозовой радиации и вредных факторов техногенной природы. Это свидетельствует о том, что значительная часть населения постоянно испытывает достаточно сильное мутагенное давление сочетанного типа. Хроническое воздействие данных факторов может оказать критическое генотоксичное влияние на генетический статус человеческой популяции в республике, в частности, в форме резкого увеличения частоты и тяжести генетических (врожденные пороки развития, пренатальная гибель, нарушение репродуктивности, стерильность) и онкологических заболеваний.

В настоящее время общепризнанным является факт, что формирующаяся в результате хронического воздействия генотоксичных факторов генетическая нестабильность ведет не только к новообразованиям, но может быть также ответственна и за ряд ее отдаленных феноменов, реализующихся на организменном уровне [1–5].

Анализ процесса малигнизации клеток и дальнейшей опухолевой прогрессии показывает, что они тесно связаны с реорганизацией генома, который во многих случаях выражается структурными или численными абберрациями хромосом и изменениями их отдельных областей. В настоящее время известны многочисленные примеры хромосомных перестроек, которые либо обуславливают предрасположенность к развитию онкологических заболеваний, либо могут являться прямой причиной злокачественной трансформации [4]. Опухолевая прогрессия также часто связана с появлением клеточных клонов, несущих новые хромосомные перестройки и отличающихся от исходного штамма целым рядом признаков, имеющих непосредственное значение для прогнозирования развития заболевания и выбора оптимальной стратегии лечения [5].

Коварность хронического воздействия малых доз радиации заключается еще и в ее трудно прогнозируемом развитии, так как в этом случае основную роль начинают играть стохастические процессы и возможные последствия ее воздействия на организм человека определяются характером и местом распределения энергий в каком-то критическом, наиболее уязвимом микрообъеме (т. е. в ядре отдельной клетки или даже в его части) [6, 7]. Причем, если при воздействии высоких доз индивидуальные особенности организма (радиочувствительность, активность репарационных систем, функциональное состояние всего организма и отдельных его систем и органов) не играют сколь-нибудь существенной роли, то по мере снижения дозовых нагрузок их значение возрастает и в области малых доз индивидуальное функциональное состояние, возраст, радио-

чувствительность, могут стать определяющими для генетических и соматических изменений.

В этой связи только долговременный широкомасштабный цитогенетический мониторинг на популяционном уровне по всей территории республики, необходимость осуществления которого обоснована нами в работах [8, 9], может обеспечить определение достоверной коллективной дозы населения и в то же время на индивидуальном – дать реальную оценку повреждающих факторов, что является существенно важным для выявления индивидуумов цитогенетического и онкологического рисков и прогнозировании возможных последствий как хронического радиационного воздействия, так и сочетанных мутагенных факторов в целом.

Несмотря на многообразие методов цитогенетической диагностики (биодозиметрии), общепризнанным и официально утвержденным ВОЗ (1985, 1986) и МАГАТЭ (1992) является только классический цитогенетический метод, основанный на учете специфических хромосомных aberrаций в лимфоцитах периферической крови.

В настоящее время классический цитогенетический метод представляет собой основной инструмент отслеживания состояния генома человека в активно меняющихся экологических условиях. Однако в связи с необходимостью анализа и систематизации информации большого количества цитогенетических препаратов и трудоемкостью их анализа, особенно в случае оценки числовых aberrаций (анализ до 500–1000 метафаз на одного пациента, эффективная реализация цитогенетического метода в рамках широкомасштабного цитогенетического мониторинга требует использования специальных высокоскоростных программно-аппаратных алгоритмов обработки хромосомных биопрепаратов.

В результате выполненных нами работ [8, 10–12] впервые в Республике Беларусь осуществлена разработка компьютерного цитогенетического комплекса («Хромосома-01»). Прибор ориентирован на быструю обработку больших объемов цитогенетической информации (морфометрический анализ хромосом и микроядер клеток человека) и предназначен для использования в качестве базовых региональных станций создаваемой общереспубликанской сети компьютерного цитогенетического мониторинга.

Комплекс «Хромосома» обеспечивает: автоматизированную оценку и дифференциальный учет всех основных типов aberrаций хромосом, включая кольцевые и дицентрические хромосомы, являющиеся маркерами радиационного воздействия, кариотипирование хромосом по Денверской классификации, эффективное сжатие, архивацию и передачу цитогенетической информации; статистическую обработку и анализ результатов мониторинга, установление корреляционных связей между частотой цитогенетических аномалий и радиационно-экологическим состоянием территорий, социальным статусом, возрастом и общим состоянием здоровья обследуемых, наряду с цитогенетической диагностикой вести и цитологические исследования с созданием компьютерной базы данных соматических тканей лиц с наследственной, врожденной и онкологической патологией, объединение ряда базовых региональных станций «Хромосома» в единую общереспубликанскую телекоммуникационную сеть цитогенетического

мониторинга с созданием общей компьютерной цитогенетической и цитологической базы данных.

Одной из основных задач при разработке комплекса «Хромосома» для обеспечения возможности создания на его базе общереспубликанской сети цитогенетического мониторинга была необходимость разработки скоростных алгоритмов анализа морфометрических параметров хромосомного набора (длины плеч хромосомы, положение центромеры, центромерный и плечевой индексы и т. д.) с учетом особенностей отечественных хромосомных биопрепаратов. Это связано с тем, что методы оценки и реконструкции поглощенных биологических доз основываются на анализе структурных и числовых aberrаций хромосом человека, которые могут быть обнаружены именно морфометрическими методами [8, 13, 14].

Известные и доступные нам для тестирования программно-аппаратные алгоритмы современных систем автоматизированного анализа хромосом человека, такие как Karyo 3.1 (фирма «ВидеоТест», С.-Петербург), KaryoService (разработка МИФИ), Lucia Karyo (Чехия), используют упрощенный подход к анализу, основанный на определении только средней линии хромосомы и положения центромеры (теломеры и длины отдельных плеч хромосомы не определяются). Такая методика применима для анализа специально приготовленных цитогенетических препаратов, где у отдельных хромосом сестринские хроматиды не разделены [15]. В случае же, когда сестринские хроматиды достаточно сильно расходятся (а именно эта ситуация наиболее характерна для отечественных препаратов), данная методика приводит к многочисленным грубым ошибкам классификации хромосом. В связи с этим возникла необходимость в разработке эффективных программно-аппаратных алгоритмов, ориентированных на специфику применения в отечественной практике компьютерного цитогенетического мониторинга.

В общем виде процедура компьютерного автоматизированного анализа хромосом человека может быть представлена в виде следующих основных блоков: блока выделения изолированных объектов и определения их внешних контуров (блока сегментации); блока идентификации хромосом и определения характерных точек хромосомы, таких как центромера и теломеры; блока измерения морфометрических и фотометрических параметров хромосом; блока классификации хромосом на основе измеренных параметров в соответствии с Денверской международной классификацией [16].

В данной работе приводим краткое описание одной из частей разработанного нами скоростного алгоритма анализа хромосом, а именно блока сегментации изображения, во многом определяющего эффективность и быстродействие комплекса «Хромосома».

Исходные предпосылки: цифровой образ микроизображения (метафазной пластинки) хромосомного биопрепарата и записан в памяти компьютера. Это цифровое изображение представляет собой прямоугольную многоэлементную матрицу, каждый элемент которой (отдельный пиксель) соответствует точке изображения определенной оптической плотности препарата. Изображение счи-

таем монохромным, то есть каждому пикселю ставится в соответствие число, пропорциональное яркости данной точки изображения.

Так как изображение метафазной пластинки представляет собой совокупность темных объектов на светлом фоне, то признаком принадлежности некоторой точки изображения объекту является малое (ниже некоторого фиксированного порога) значение яркости этой точки. В соответствии с выбранным уровнем порога множество точек изображения разбивается на два подмножества: подмножество точек, принадлежащих объектам, и подмножество точек, принадлежащих фону. Задача сегментации состоит в разбиении первого подмножества на отдельные объекты и кодирование геометрических форм этих объектов в удобном для дальнейшего анализа виде. Учитывая специфику изображений метафазных пластинок – наличие слипшихся, перекрывающихся и т. д. объектов – следует отметить достаточно жесткое требование к алгоритму сегментации, заключающееся в том, что алгоритм должен разделять объекты любой сколь угодно сложной формы.

В основу разработанного алгоритма сегментации, приведенного ниже, были положены следующие критерии построения максимально быстрого алгоритма:

1. Алгоритм должен протестировать на принадлежность объектам каждую точку изображения, причем обращаться к одной и той же точке минимальное число раз (в идеальном случае один раз).

2. При анализе изображения алгоритм должен использовать естественную последовательность расположения пикселей в памяти компьютера, то есть выполнять построчный анализ изображения.

3. Кодирование формы выделенных объектов должно производиться в терминах дискретных изображений, то есть не следует использовать характеристики, которые применяются для описания непрерывных кривых, например, кривизна дуги.

Соблюдение этих критериев обеспечило разработку алгоритма, у которого минимизировано число обращений к оперативной памяти и количество расчетных операций, что эквивалентно максимизации быстродействия. Основными элементами, которыми оперирует алгоритм, являются хорда, сегмент, объект, дискретный вектор и векторный контур.

Хорда – это непрерывная часть строки изображения, принадлежащая некоторому объекту. Она однозначно определяется двумя точками (левой и правой) или четырьмя целыми числами (их координатами).

Сегмент – это совокупность последовательно перекрывающихся хорд, причем в одной строке изображения сегменту может принадлежать только одна хорда. Перекрывающимися хордами называются хорды, расположенные в соседних строках, проекции которых на ось X перекрываются (рис. 1). Кроме того, два сегмента, содержащие хорды из одной строки, не должны содержать перекрывающихся хорд (рис. 2).

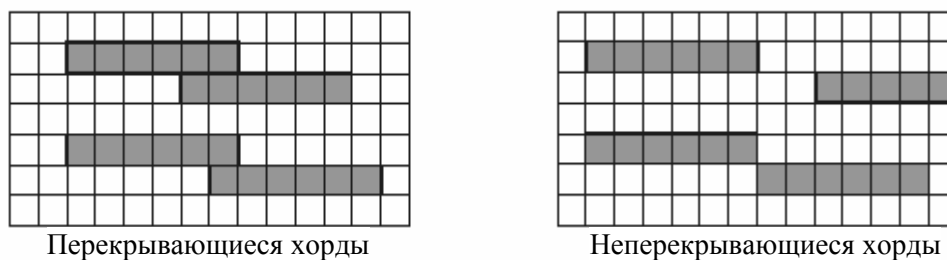


Рис. 1. Хорды

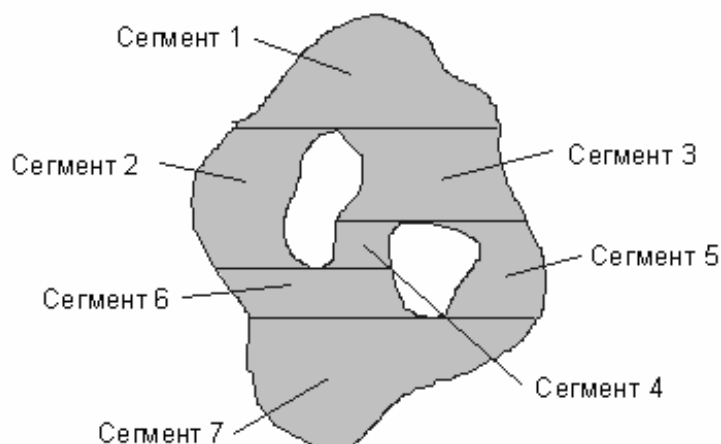


Рис. 2. Объект – совокупность связанных сегментов

Объектом будем называть совокупность связанных сегментов. Сегменты называются связанными, если последняя хорда одного сегмента перекрывается с первой хордой другого или наоборот. Например, у объекта, изображенного на рис. 2, сегмент 1 связан с сегментами 2 и 3, сегмент 3 связан с сегментами 4 и 5 и т. д. Очевидно, что список связанных сегментов однозначно характеризует отдельный объект изображения и содержит полную информацию о его форме. Однако, как показывает анализ, описание объекта на основе списка сегментов является неудобным в задачах классификации объектов по их форме. Более приемлемым следует признать описание формы, основанное на построении контуров объектов.

Контуром, как известно, называется множество внешних точек плоского объекта. В нашем случае контур представляет собой последовательность дискретных пикселей изображения, расположенных на краю объекта. В связи с этим оказалось удобным ввести понятия дискретного вектора и векторного контура.

Дискретный вектор, как и обычный вектор на плоскости, характеризуется направлением (углом азимута) и длиной с той лишь разницей, что азимут дискретного вектора может принимать восемь фиксированных значений, условно обозначенных от 0 до 7 (рис. 3, а), и длина его должна быть кратна размеру пикселя в соответствующем направлении.

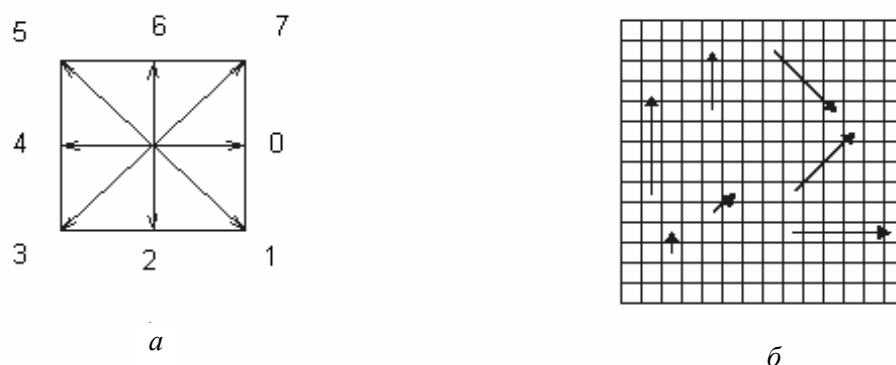


Рис. 3. Дискретные векторы

Следовательно, дискретный вектор всегда направлен либо вдоль сетки растра, либо по диагонали, а его начало и конец расположены в центрах пикселей (рис. 3, б).

Понятие дискретного вектора оказывается весьма удобным для описания контура плоской фигуры дискретного изображения. Для этой цели нами введен еще один объект – векторный контур, определяемый как последовательность дискретных векторов, расположенных на пикселях контура объекта, при этом начало одного вектора совпадает с концом предыдущего, а точками стыковки векторов являются пиксели, в которых контур изменяет свое направление (рис. 4). Таким образом, векторный контур однозначно определяет контур объекта и обеспечивает достаточно компактную его кодировку в терминах дискретного изображения. Похожая процедура кодирования контура была предложена в работе [17], но в ней использовались лишь дискретные векторы единичной длины, что в данном случае снижает эффективность алгоритма.

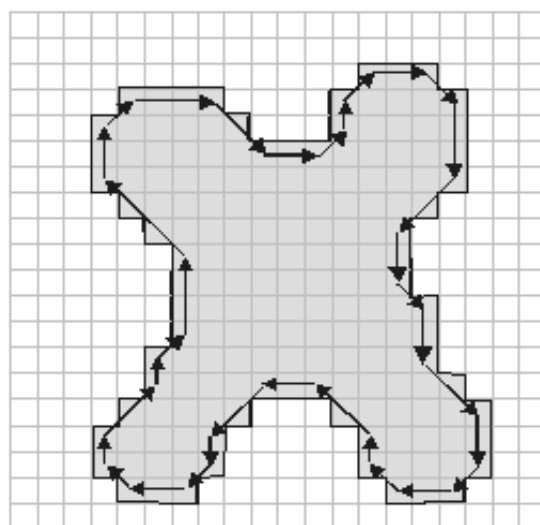


Рис. 4. Векторный контур

Как показал дальнейший анализ, векторный контур оказался весьма удобным инструментом для машинного исследования формы плоских объектов с целью их классификации.

Предложенный алгоритм сегментации использует для описания объекта как список сегментов, так и векторный контур. Сегментное описание используется для представления и манипуляций визуальной копией объекта на экране дисплея, а векторный контур – для анализа формы и процедуры классификации. С целью дальнейшей оптимизации алгоритма по быстродействию в соответствии с критериями 1 и 2 процессы построения сегментов и векторных контуров объектов выполняются параллельно.

Основные операции алгоритма сегментации заключаются в следующем. Базовым циклом алгоритма в соответствии с критерием 2 является просмотр и анализ отдельной строки раstra. Анализ строк выполняется последовательно сверху вниз. Начальной процедурой цикла является процедура поиска очередной хорды в текущей строке. Процедура просматривает пиксели строки слева направо и при обнаружении пикселя с яркостью ниже пороговой фиксирует левый конец хорды. После этого ищется первый пиксель с яркостью выше пороговой, который определяет правый конец хорды. Выделенная хорда в виде трех целых чисел (номера строки, X-координаты левого конца и X-координаты правого конца) передается программному блоку предварительного анализа принадлежности хорды каким-либо открытым сегментам открытых объектов. Открытыми объектами и сегментами называются те объекты и сегменты, которые имеют хорды в предыдущей строке. После завершения работы этого блока управление вновь передается начальной процедуре, которая ищет следующую хорду. Данный процесс продолжается до тех пор, пока не будет найдена последняя хорда в данной строке. После этого управление передается блоку окончательного построения сегментов и контуров объекта. На этом базовый цикл завершается, и происходит переход к следующей строке раstra.

Программный блок предварительного анализа хорды проверяет последние хорды всех открытых сегментов на предмет перекрытия с текущей хордой и отмечает все случаи перекрытия. Если хорда оказывается общей для сегментов, принадлежащих различным открытым объектам, то производится слияние этих объектов в один. Блок предварительного анализа необходим в силу того, что на этом этапе невозможно произвести присоединение хорды к конкретному сегменту конкретного объекта, так как следующая, пока неизвестная, хорда данной строки может существенно изменить структуру объекта.

Блок окончательного построения сегментов получает управление после того, как будут найдены все хорды текущей строки. Он производит окончательную перестройку структуры всех открытых объектов в соответствии с данными предварительного анализа всех текущих хорд, найденных в данной строке. Если какому-либо открытому сегменту не принадлежит ни одна из текущих хорд, то сегмент закрывается, т. е. он не будет участвовать в дальнейших изменениях структуры объекта, причем, если этот сегмент является последним в списке сег-

ментов объекта, то закрывается также и весь объект, который считается полностью построенным.

В том случае, когда текущая хорда не перекрывается ни с одним из открытых сегментов, создается новый открытый объект, в котором первый открытый сегмент состоит из одной этой хорды.

Если текущая хорда перекрывается только с одним сегментом, который не перекрывается с другими текущими хордами, то данная хорда присоединяется к этому сегменту и становится его последней хордой, при этом сегмент остается открытым.

Если же текущая хорда перекрывается с несколькими открытыми сегментами, то все эти сегменты закрываются, и создается новый открытый сегмент на основе текущей хорды, связанный с этими закрытыми сегментами.

Если какой-либо открытый сегмент перекрывается с несколькими текущими хордами, то такой сегмент закрывается, а на базе текущих хорд создаются новые открытые сегменты, связанные с закрытым сегментом.

Параллельно с изменением структуры сегментов в данном блоке проводится построение внешних и внутренних контуров объектов. Так, операция открытия нового объекта сопровождается созданием внешнего контура этого объекта.

Операция закрытия сегментов приводит либо к слиянию контуров (внешнего с внутренним, внутреннего с внутренним), либо к замыканию внутренних контуров. Создание новых открытых сегментов приводит к созданию новых внутренних контуров. Здесь следует отметить, что незамкнутый внутренний контур в дальнейшем может стать частью внешнего контура в результате слияния с последним.

Каждый сегмент справа и слева ограничен участками двух контуров (исключение составляют первый и последний сегменты объекта, ограниченные одним внешним контуром), которые будем называть прилегающими. В процессе присоединения текущей хорды к открытому сегменту производится добавление к каждому из прилегающих векторных контуров одного или двух векторов в зависимости от соотношения координат текущей хорды и последней хорды сегмента. На рис. 5 приведены возможные варианты построения для левого (а) и правого (б) прилегающего контура.

В отношении процедуры слияния различных контуров следует отметить, что при анализе сложных фигур могут возникать достаточно запутанные комбинации вновь создаваемых и объединяемых контуров, которые должны корректно обрабатываться программой. Это обстоятельство обуславливает определенную сложность программного кода, реализующего данный алгоритмический блок. С другой стороны, эту сложность можно рассматривать в качестве платы за эффективность в плане быстродействия системы.

Результатом выполнения алгоритма сегментации является список объектов, выделенных из исходного изображения хромосомного препарата. Каждый объект содержит список связанных сегментов, принадлежащих объекту, внешний контур, список внутренних контуров и сами контуры. Каждый сегмент содержит список входящих в него хорд. Таким образом, в памяти компьютера формируется набор данных, которые полностью характеризуют форму и параметры объектов, обнаруженных на исходном изображении метафазной пластинки. Эти дан-

ные являются исходным материалом для последующего морфометрического анализа выделенных плоских объектов (хромосом, микроядер), вычисления их геометрических параметров и проведения классификации.

Успешная эксплуатация трех экземпляров разработанного комплекса «Хромосома» в РНПЦ радиационной медицины и экологии человека (РНПЦ РМ и ЭЧ, г. Гомель) и Гомельском государственном медицинском университете показала высокую эффективность разработанных алгоритмов и их хорошую адаптацию к отечественным хромосомным препаратам.

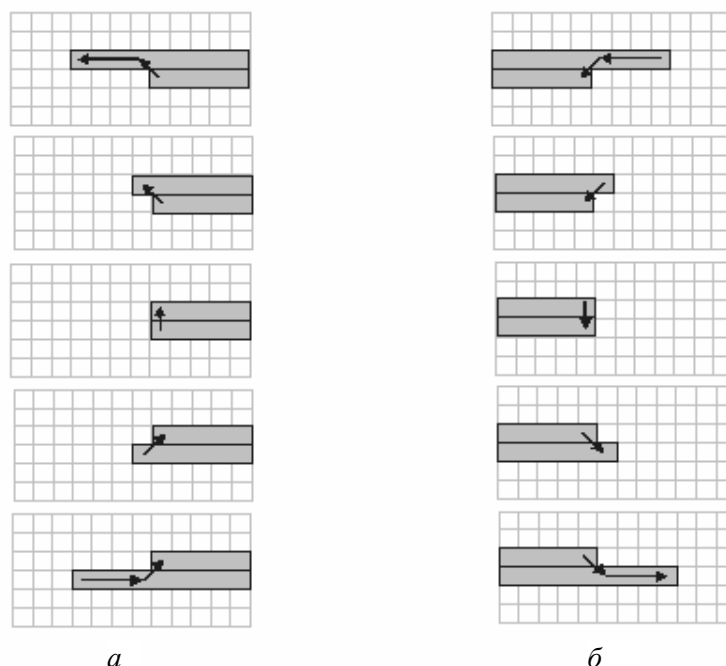


Рис. 5. Возможные варианты построения для левого (а) и правого (б) прилегающего контура

Полученные нами совместно с РНПЦ РМ и ЭЧ результаты установочного цитогенетического мониторинга на комплексе «Хромосома» по выборке 252 пациента [10, 18] позволили сделать следующие выводы.

Наиболее выраженное нарастание маркеров радиационного воздействия отмечено у мужчин Брестской области и женщин Гомельской области.

Уровень геномной нестабильности при сравнении взрослого и детского населения в различных областях республики был более выражен у детей и подростков (за исключением мужчин Минской области и женщин Гомельской области), что свидетельствует о существенно большей чувствительности детей к факторам экологического неблагополучия и косвенно указывает на нарастание генотоксичного фактора в последние годы (именно поэтому высокий уровень нестабильности генома отмечается у детей).

Суммарное количество aberrаций у детей $3.78 \pm 0.41 \%$ – достаточно высоко и находится на верхней границе нормы или несколько ее превышает (относительно ранее опубликованных данных).

Обращает на себя внимание наличие aberrаций стабильного типа («атипичные хромосомы»), что свидетельствует о нарастании уровня генетического риска, так как они могут проходить «сито» митоза и передаваться по наследству в ряду клеточных генераций.

С увеличением возраста обследуемых наблюдается нарастание количества дицентрических и кольцевых хромосом. В то же время, в параллель с этим, наблюдается и рост частоты полиплоидных клеток. Последнее является весьма неблагоприятным признаком, так как связано с тенденцией ослабления одной из старейших форм генетической защиты – увеличением дозы гена.

Региональные особенности цитогенетического статуса в основном были обусловлены aberrациями неспецифического типа (одиочные фрагменты) и параметрами, характеризующими явление геномной нестабильности – общей частотой aberrаций и aberrантных клеток. На рис. 6 приведены распределения региональных особенностей цитогенетического статуса у детей. Суммарные данные свидетельствуют о том, что наиболее выраженная дестабилизация генома отмечается у детей из Брестской области (частота хромосомных aberrаций $5.79 \pm 0.57\%$, в условном контроле (Минская область) – $3.12 \pm 0.68 \%$, $P < 0.05$).

Следует также отметить, что именно в этой группе отмечена самая высокая частота стабильных aberrаций (атипичных клеток – $0.06 \pm 0.03 \%$, против $0.05 \pm 0.03 \%$ в Гомельской области, в условном контроле они полностью отсутствуют).

Таким образом, данные убедительно свидетельствуют о том, что в Брестской популяции наблюдаются существенно более глубокие изменения генома, чем в Гомельской и тем более в Минской области.

Суммируя все изложенное выше, можно констатировать:

- выраженность мутационного давления по территории Республики варьирует в достаточно широких пределах;
- у лиц, проживающих в экологически неблагоприятных условиях, отмечаются серьезные нарушения стабильности генома соматических клеток;
- отмечается аномально высокий уровень aberrаций хромосом у детей Брестской области.

Выявленные тенденции нарастания уровня цитогенетического риска требуют ускорения создания полноценной общереспубликанской сети цитогенетического мониторинга, минимальный объем которой должен состоять из 10–12 региональных станций, объединенных в единую телекоммуникационную сеть с общей компьютерной базой данных. В рамках данной задачи в течение ближайших 3 лет планируется ввести в эксплуатацию еще 5–7 станций «Хромосома» в ряде медицинских учреждений, специализирующихся в области радиационной цитогенетики, пренатальной диагностики, врожденных и наследственных патологий, онкологии.

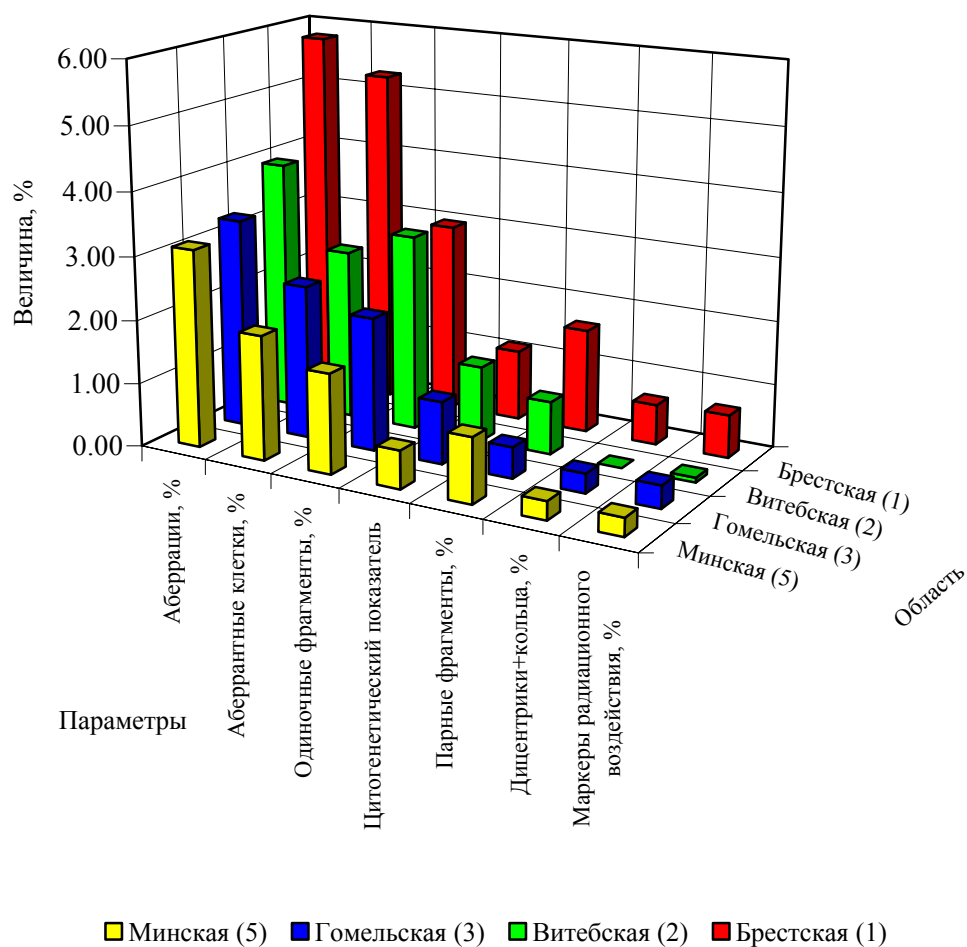


Рис. 6. Распределения региональных особенностей цитогенетического статуса у детей

В наиболее сложных случаях цитогенетических патологий и подозрениях на онкозаболевания, в плане изучения более тонкой морфологии генетических изменений на молекулярном уровне хромосом, например, исследований распределения и концентрации ДНК и других хромосоμοобразующих веществ, предусматривается возможность дополнения используемого классического метода цитогенетического анализа, как основного метода широкомасштабного цитогенетического мониторинга, осваиваемыми нами в настоящее время методиками и разрабатываемыми программно-аппаратными средствами для селективной окраски хромосом и высокоточного измерения параметров хромосом на молекулярном уровне спектральными методами – FISH, in situ гибридизацией.

Решение проблем по созданию общереспубликанской сети компьютерного цитогенетического мониторинга, как задачи широкомасштабного обследования, систематизации, обработки и обобщения цитогенетической информации на популяционном уровне позволит:

- ретроспективно верифицировать индивидуальные и коллективные дозы лучевых нагрузок;
- проследить территориально-временную динамику цитогенетических нарушений;
- дифференцированно оценивать степень генотоксичности неблагоприятных экологических факторов окружающей среды;
- обнаруживать появление клонов клеток с хромосомными aberrациями – маркерами возможной опухолевой трансформации;
- своевременно выявлять, контролировать и осуществлять необходимые лечебные, реабилитационные и профилактические мероприятия с категориями населения цитогенетического и онкологического рисков;
- определять генотоксичные территории Республики Беларусь;
- прогнозировать возможные отдаленные медико-генетические последствия хронического воздействия малых доз радиации и техногенных факторов на организм человека в постчернобыльский период.

Литература

1. Воробцова И. Е. // Радиобиология. 1994. Т. 31, № 1. С. 568.
2. Ллойд Д. К., Эдварс А. А. // Гематология и трансфузиология. 1993. Т. 38. С. 3.
3. Спутковский Д. М. // Вестник Российской АМН. 1992. № 4. С. 39.
4. Mitelman F. et al. // Nature Genetics. Special issue. 1997. P. 415.
5. Potter A. M., Watmore A. // Human Cytogenetics: a practical approach. 1992. Vol. 11. P. 27.
6. Севаньяев А. В. // Радиобиология. 1991. Т. 31. Вып. 4. С. 600.
7. Севаньяев А. В., Моисеенко В. В., Цыб А. Ф. // Радиационная биология. Радиоэкология. 1994. Т. 34. Вып. 6. С. 782.
8. Разработать и создать опытный образец компьютерной системы микроядерного анализа и кариотипирования хромосом человека для оперативной диагностики состояния критических систем организма при радиационных и токсических воздействиях. Отчет НИОКР, гос. рег. № 19993108. Минск. НИИ ЯП БГУ, 1999. 46 с.
9. Иванов В. И., Лазарчик А. Н. // Тр. междунар. науч.-техн. конф. «Вузовская наука», Минск, 2000. С. 58.
10. Разработать и создать программно-методические и аппаратные средства генетического мониторинга населения Республики Беларусь, провести установочный мониторинг и сформировать компьютерные базы данных. Отчет НИОКР, гос. рег. № 2002876. Минск, НИИ ЯП БГУ, 2002. 42 с.
11. Провести модернизацию, изготовить и поставить опытный образец программно-аппаратного цитогенетического комплекса «Хромосома –01». Отчет НИОКР, гос. рег. № 2005304. Минск, 2005. 16 с.
12. Модернизация, изготовление, инсталляция и отладка у Заказчика двух компьютерных цитогенетических анализатора «Хромосома-01» для изучения цитогенетического статуса различных групп населения, получившего дополнительные дозы

- облучения в результате катастрофы на ЧАЭС, в том числе и у больных раком щитовидной железы. Отчет НИОКР, гос. рег. № 20053340. Минск, 2006. 28 с.
13. *Иванов В. И., Лазарчик А. Н.* // Фундаментальные и прикладные физические исследования 1986–2001 гг. 2001. С.334.
 14. *Захаров А.Ф., Бенюш В. А.* и др. // Хромосомы человека. (Атлас). АМН СССР. 1982. С.186.
 15. *Moradi M., Setarehdan K.* // Pattern Recognition Letters. 2006. Vol. 27. P. 19.
 16. *Гиндилис В. М., Иваницкий Г. Р.* // Сб. Современные проблемы машинного анализа биологических структур. 1970. С. 34.
 17. *Freeman H.* // IRE Trans. Electronic Computers. 1961. Vol. EC-10. P. 260.
 18. *Мельнов С. Б., Иванов В. И.* и др. // Достижения медицинской науки Беларуси. 2003. Вып. 8. С. 16.

**CONCEPTION, TASKS AND RESULTS OF CONSTRUCTING
COMPUTER SYSTEM OF CYTOGENETIC MONITORING OF
POPULATION OF REPUBLIC OF BELARUS IN THE
POSTCHERNOBYL PERIOD**

V. I. Ivanov, A. N. Lazarchik

Development of a computer cytogenetic complex created in Belarus is discussed. This complex is oriented on the rapid processing of large volumes of cytogenetic information such as a morphometric analysis of chromosomes and micronuclei of humans cells.

The basic concept, tasks and results of computer system of cytogenetic monitoring of population of Republic of Belarus in the postchernobyl period is described. It is shown that this complex can be used as a base regional station in the constructing republic network of computer cytogenetic monitoring.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНСПЕКТИРУЕМЫХ ПАРАМЕТРОВ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

**С. В. Черепица, С. М. Бычков, А. Н. Коваленко, А. Л. Мазаник,
Н. М. Макоед, Н. Н. Гремяко*, Д. Е. Кузменков**, Я. Л. Лучинина****

Развитие методов газовой хроматографии с применением высокоэффективных капиллярных колонок позволило получать достаточно полную картину детального углеводородного состава (Detailed Hydrocarbon Composition – ДНС) бензинов и бензиновых фракций. На основе данных ДНС в ряде работ [1–8] было предложено расчетным методом получать эффективные параметры нефтепродуктов, в том числе и инспектируемые параметры автомобильных бензинов.

В работах [9–11] впервые были приведены данные о метрологически аттестованной методике определения основных инспектируемых параметров автомобильных бензинов методом газовой хроматографии. В 2001 г. разработан, утвержден и введен в действие государственный стандарт СТБ 1276–2001 [12] Республики Беларусь, регламентирующий методику определения параметров автомобильных бензинов. В 2001 г. лаборатория аналитических исследований Института ядерных проблем Белгосуниверситета была аккредитована на право проведения испытаний автомобильных бензинов по указанным выше нормативным документам. Два года интенсивной работы в рамках аккредитованной лаборатории показали, что имеется достаточно большой спрос на исследование дизельного топлива. Достижения в области газовой хроматографии дизельного топлива с точки зрения инспектируемых параметров данного нефтепродукта не велики. Распределение по температурам кипения – единственный показатель, на который имеется нормативный документ [3]. Была поставлена задача «минимум» – определять фракционный состав, цетановое число, плотность и температуру вспышки дизельного топлива по данным ДНС.

Измерения физико-химических свойств дизельного топлива выполняют газохроматографическим методом. Жидкая проба топлива вводится в хроматограф, который оборудован пламенно-ионизационным детектором и кварцевой капиллярной колонкой с неполярной неподвижной жидкой фазой полидиметилсилоксана. В инжекторе проба переводится в паровую фазу и гелиевым газом носителем переносится в колонку, в которой углеводородные компоненты разделяются в порядке их температур кипения. Компоненты улавливаются пламенно-ионизационным (ПИД) детектором по мере их выхода из колонки. Сигнал детектора обрабатывается регистрирующей системой, которая обнаруживает пики, определяет площади под ними и идентифицирует их путем сравнения параметров удерживания с табличными параметрами. Содержание индивидуальных углеводородов определяется нормализацией площади. Цетановое число и фракционный состав определяют расчетным методом по содержанию индивидуальных веществ в анализируемой пробе. Плотность и температуру вспышки определяют расчетным методом по цетановому числу и фракционному составу.

* ОАО «Мозырский НПЗ».

** ГЭКЦ МВД Республики Беларусь.

1. Экспериментальные исследования

Измерения дизельного топлива проводили с использованием следующего оборудования (табл. 1, 2).

Таблица 1

Измерительное оборудование

Характеристики измерительного оборудования	Оборудование
Газовый хроматограф в комплекте с пламенно-ионизационным детектором с пределом детектирования не более $2 \cdot 10^{-12}$ гС/с и возможностью программирования температуры термостата колонки от 50 до 320 °С со скоростью 2 °С/мин.	КристалЛюкс-4000
Система регистрации, обработки и хранения хроматографических данных	UniChrom ¹ [13–4]
Колонка хроматографическая капиллярная кварцевая с неполярной неподвижной жидкой фазой полидиметил-силоксана длиной 100 м, диаметром 0.25 мм и толщиной пленки 0.5 мкм	Rtx [®] -1 PONA

Таблица 2

Условия хроматографирования

Объект	Параметры	Значения
Программа температуры термостата колонки	Начальная температура	50 °С
	Длительность начального изотермического участка	5 мин
	Скорость нагрева термостата	2 °С /мин
	Конечная температура	320 °С
	Длительность конечного изотермического участка	0 мин
Инжектор	Температура	300 °С
	Коэффициент деления потока при 35 °С	1:100
	Объем вводимой пробы	0.2 – 0.6 мкл
Детектор	Тип	ПИД
	Температура	300 °С
	Расход водорода (топливный газ)	30 мл/мин
	Расход воздуха (окисляющий газ)	300 мл/мин
	Расход гелия (поддув)	до 30 мл/мин
Газ-носитель	Тип	гелий
	Давление на входе в колонку	400 кПа
	Расход через колонку при 50 °С составляет	3.3 мл/мин

¹ Система UniChrom в комплексе с хроматографом КристалЛюкс-4000 используется для контроля и управления режимами хроматографа. Программное обеспечение системы UniChrom позволяет выполнять обработку и расчет параметров автомобильных бензинов и дизельного топлива по МВИ.

Измерения проводили в аккредитованной лаборатории аналитических исследований Института ядерных проблем Белгосуниверситета. Анализировали контрольные образцы дизельного топлива.

Контрольные образцы готовили на Мозырском нефтеперерабатывающем заводе (МНПЗ) и рассылали в аккредитованные лаборатории для анализа нефтепродуктов стандартными методами [15–19]. Таким образом, каждый контрольный образец дизельного топлива был исследован в ЦЗЛ МНПЗ, ЦЗЛ ННПЗ (Новополоцкий нефтеперерабатывающий завод) и в 202 лаборатории химмотологического Центра Министерства обороны Республики Беларусь.

По полученным данным были определены метрологические характеристики образцов: аттестованные значения фракционного состава, цетанового числа, плотности, температуры вспышки и границы абсолютной погрешности аттестованной характеристики при доверительной вероятности 0,95 [20].

2. Идентификация и содержание индивидуальных углеводородов в топливе

В дизельное топливо входят компоненты разных классов – парафины, ароматические углеводороды, циклические углеводороды, непредельные углеводороды и другие соединения. Нормальные парафины и ароматические соединения составляют основу данного нефтепродукта. Локализованные пики нормальных парафинов и распределенные ароматические соединения определяют общий особый вид хроматограммы дизельного топлива (рис. 1). Количество пиков на хроматограмме в зависимости от образца нефтепродукта и используемого метода интегрирования колеблется от 700 до 900. Четко видимую гребенку пиков образуют нормальные парафины от C5 до C28, что легко проверить путем измерения смеси нормальных парафинов в указанных выше условиях.

Для решения задачи «минимум» более детальная идентификация индивидуальных углеводородов, входящих в состав дизельного топлива, не требуется.

Содержание индивидуальных соединений X_i определяется методом внутренней нормализации по формуле

$$X_i = \frac{A_i}{\sum_{j=1}^L A_j}, \quad (1)$$

где A_i – площадь под пиком i -го компонента; A_j – площадь под пиком j -го компонента; j – индекс суммирования, пробегающий последовательно по всем пикам хроматограммы; L – количество пиков на хроматограмме.

Относительные коэффициенты чувствительности ПИД для всех соединений близки к единице и в расчете концентраций не учитываются.

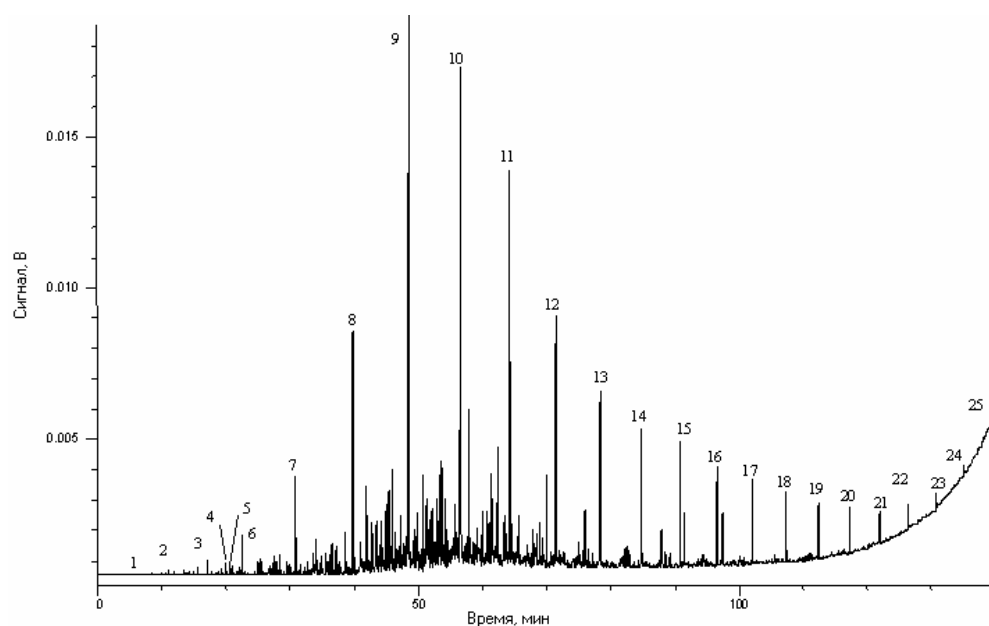


Рис. 1. Общий вид хроматограммы дизельного топлива

1. n-Pentane	8. n-Decane	15. n-Heptadecane	22. n-Tetracosane
2. n-Hexane	9. n-Undecane	16. n-Octadecane	23. n-Pentacosane
3. n-Heptane	10. n-Dodecane	17. n-Nonadecane	24. n-Hexacosane
4. 2-Methylheptane	11. n-Tridecane	18. n-Eicosane	25. n-Heptacosane
5. 4-Methylheptane	12. n-Tetradecane	19. n-Heneicosane	
6. n-Octane	13. n-Pentadecane	20. n-Docosane	
7. n-Nonane	14. n-Hexadecane	21. n-Tricosane	

3. Цетановое число дизельного топлива

В основе газохроматографического метода определения цетанового числа положено предположение, что каждому индивидуальному компоненту топлива можно поставить в соответствие определенный эффективный цетановый коэффициент. Эффективное цетановое число топлива, как смеси, находится суммированием произведений доли индивидуальных компонентов на их эффективные цетановые коэффициенты. С целью упрощения процедуры расчета вся хроматограмма разбивается на 47 групп:

$$A = \sum_{i=1}^{47} X_i \cdot A_i, \quad (2)$$

где X_i – суммарная доля углеводородов i -й фракции; A_i – эффективное цетановое число для i -й фракции в соответствии с табл. 3.

Эффективные октановые коэффициенты нами найдены методом линейной регрессии по хроматографическим данным образцов аттестованного топлива. Полученные эффективные октановые коэффициенты представлены в табл. 3.

Таблица 3

**Состав и физико-химические свойства фракций
дизельного топлива**

Фракция дизельного топлива		$A (\pm 0.1)$
1	до н-пентана	36.1
2	н-пентан	82.1
3	между н-пентаном и н-гексаном	53.0
4	н-гексан	34.4
5	между н-гексаном и н-гептаном	78.7
6	н-гептан	47.3
7	между н-гептаном и н-октаном	13.6
8	н-октан	36.5
9	между н-октаном и н-нонаном	52.6
10	н-нонан	52.6
11	между н-нонаном и н-деканом	39.9
12	н-декан	42.9
13	между н-деканом и н-ундеканом	52.4
14	н-ундекан	52.7
15	между н-ундеканом и н-додеканом	43.7
16	н-додекан	42.7
17	между н-додеканом и н-тридеканом	39.9
18	н-тридекан	32.7
19	между н-тридеканом и н-тетрадеканом	29.5
20	н-тетрадекан	98.7
21	между н-тетрадеканом и н-пентадеканом	75.6
22	н-пентадекан	72.9
23	между н-пентадеканом и н-гексадеканом	56.0
24	н-гексадекан	81.7
25	между н-гексадеканом и н-гептадеканом	44.9
26	н-гептадекан	57.2
27	между н-гептадеканом и н-октадеканом	54.0
28	н-октадекан	56.3
29	между н-октадеканом и н-нонадеканом	54.8
30	н-нонадекан	54.3
31	между н-нонадеканом и н-эйкозаном	54.5
32	н-эйкозан	63.1
33	между н-эйкозаном и н-генэйкозаном	49.1
34	н-генэйкозан	57.2

Фракция дизельного топлива		$A (\pm 0.1)$
35	между н-генэйкозаном и н-докозаном	57.8
36	н-докозан	52.3
37	между н-докозаном и н-трикозаном	53.3
38	н-трикозан	57.5
39	между н-трикозаном и н-тетракозаном	55.8
40	н-тетракозан	60.0
41	между н-тетракозаном и н-пентакозаном	48.2
42	н-пентакозан	53.1
43	между н-пентакозаном и н-гексакозаном	35.6
44	н-гексакозан	66.3
45	между н-гексакозаном и н-гептакозаном	38.0
46	н-гептакозан	43.2
47	после н-гептакозана	55.2

В таблице использовано следующее обозначение: A – эффективное цетановое число, рассчитанное методом линейной регрессии, с погрешностью не более ± 0.1 единицы.

Анализ результатов определения цетанового числа (рис. 2) показал, что отклонение цетанового числа, рассчитанного по хроматограмме, от цетанового числа, полученного на стандартном одноцилиндровом двигателе [15], не превышает 0.5 цетановых единиц.

4. Фракционный состав

Фракционный состав определяется в два этапа. Сначала определяется распределение фракций по температурам кипения в соответствии с [20], а потом выполняется переход от температур кипения к температурам отгона по [17]. Данный метод отличается от [3] тем, что расчет выполняется по хроматограмме, представляющей собой дискретный спектр пиков. Здесь четко известно положение нормальных парафинов и отпадает надобность в предварительной калибровке системы смесью нормальных парафинов.

Зависимость температур кипения по [3] и температур отгона по [17] представляет собой полином вида

$$T_{\chi} = -9.12 \cdot 10^{-6} \cdot (T_{\chi}^*)^3 + 8.007 \cdot 10^{-3} \cdot (T_{\chi}^*)^2 - 1.446 \cdot T_{\chi}^* + 268.0, \quad (3)$$

где T_{χ}^* – температура кипения χ процентов смеси по [20] в °C; T_{χ} – температура отгона в °C, соответствующая χ проценту отгона нефтепродукта по [17].

Отклонение температуры отгона, измеренной по хроматограмме и по [17] не превышает 15 °C.

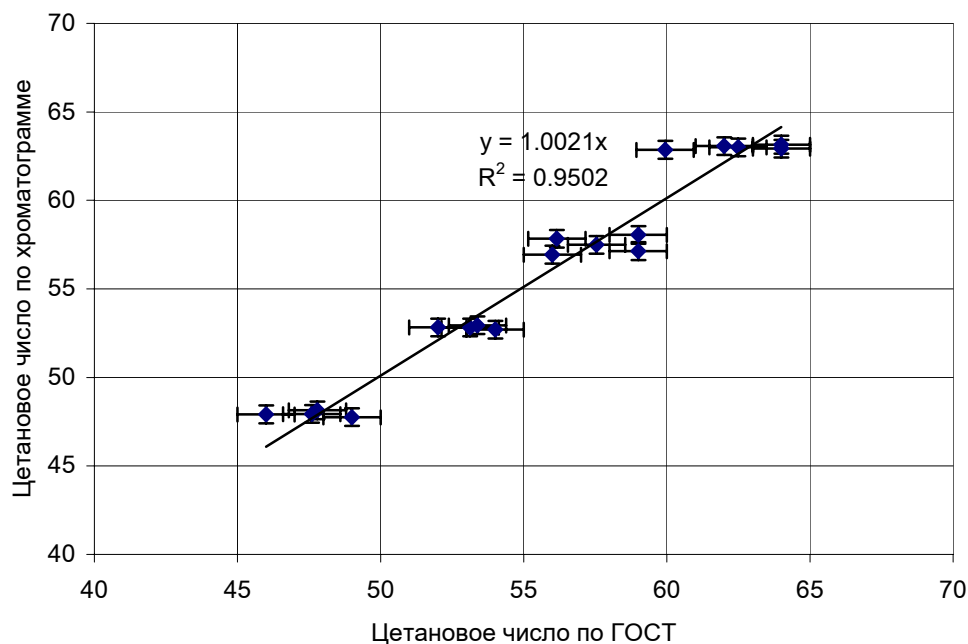


Рис. 2. Расхождения между цетановыми числами, измеренными по ГОСТ 3122 и по хроматограмме. Отклонение от среднего результатов измерений по ГОСТ 3122 составляют ± 2 цетановые единицы. Отклонение от среднего результатов измерений по хроматограмме не превышают ± 0.5 цетановых единиц

Пример кривой разгонки, полученной по хроматографическим данным, приведен на рис. 3.

5. Плотность

Плотность дизельного топлива ρ , г/см³, при 15 °С рассчитывают по формуле

$$\rho = 1.0593 - \sqrt{0.5352 + 0.000715 \cdot T_{50} - 0.1263 \cdot (\lg T_{50})^2 + 0.00129 \cdot A}, \quad (4)$$

где A – цетановое число, вычисленное по формуле (2); T_{50} – температура, °С, отгона 50 % дизельного топлива, вычисленная по формуле (3).

6. Температура вспышки, определяемая в закрытом тигле

Экспериментально было установлено, что температура вспышки дизельного топлива линейно зависит от цетанового числа (рис. 4).

Температуру вспышки, °С, рассчитывают по формуле

$$T_g = 0.675 \cdot A + 30.8, \quad (5)$$

где A – цетановое число, вычисленное по формуле (2).

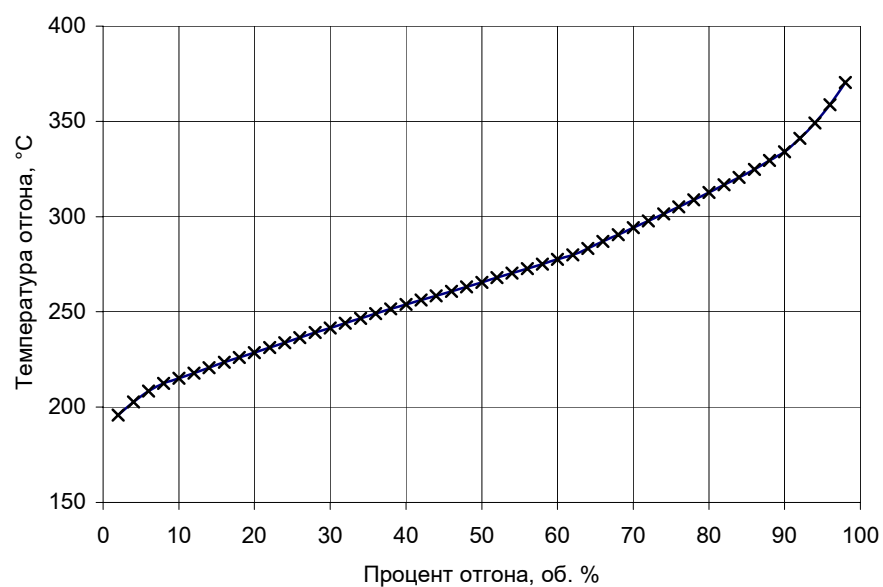


Рис. 3. Пример кривой разгонки дизельного топлива, получаемой по хроматограмме

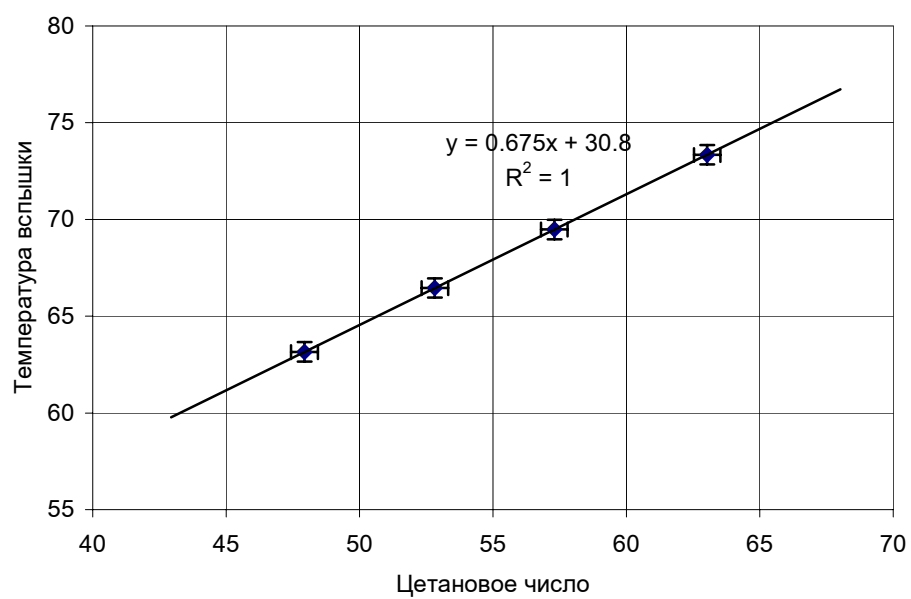


Рис. 4. Зависимость температуры вспышки от цетанового числа дизельного топлива

7. Метрологические характеристики методики

Разработанная методика обеспечивает определение физико-химических свойств дизельного топлива с погрешностями, не превышающими значений, приведенных в табл. 4.

Таблица 4

Характеристики погрешности измерений цетанового числа, фракционного состава, плотности и температуры вспышки

Наименование показателя качества	Показатель сходимости $\sigma_{cx,P}^0[\Delta]$ при доверительной вероятности 0.95	Границы основной абсолютной погрешности при доверительной вероятности 0.95
Цетановое число	0.3	± 3.0
Фракционный состав, представленный температурами, °C:		
50 % отгона	1.5	± 15.0
96 % отгона	1.5	± 15.0
Плотность при 20 °C, кг/м ³	1.4	± 8.0
Температура вспышки, определяемая в закрытом тигле, °C	0.2	± 6.0

Представленные в таблице значения абсолютной погрешности обусловлены погрешностями контрольных образцов дизельного топлива. Возможно уменьшение погрешности методики за счет увеличения аккредитованных лабораторий, принимающих участие в аттестации образцов.

8. Заключение

Таким образом, по результатам только одного газохроматографического измерения образца дизельного топлива, длящегося порядка 140 мин, можно определить в комплексе такие важные его характеристики, как: содержание нормальных парафинов, фракционный состав, соответствующий ГОСТ 2177, цетановое число, соответствующее ГОСТ 3122, плотность, соответствующую ГОСТ 3900, температуру вспышки, соответствующую ГОСТ 6356.

Разработанная методика комплексного анализа параметров дизельного топлива может использоваться как альтернативная методам по ГОСТ, ISO, ASTM и EN. Ее могут использовать организации, не имеющие специфического оборудования для воспроизведения стандартных методов. Стабильность воспроизводимости результатов позволяет четко выявлять несоответствие продуктов ГСМ их сертификатам, когда имеются факты фальсификации смешения и разбавления ГСМ.

Потребителями данной методики могут быть любые производители, поставщики, переработчики или получатели нефтепродуктов или нефтяных фракций, а также контрольные лаборатории и организации по исследованию нефти и нефтепродуктов. Возможность расчета на основе данных углеводородного анализа довольно большого количества эффективных параметров как промежуточных, так и товарных видов нефтепродуктов позволяет использовать данную

МВИ при построении на нефтеперерабатывающих предприятиях системы прогнозирования и оптимизации процессов компаундирования при производстве бензинов, реактивного и дизельного топлива [20].

Литература

1. МВИ.МН 998-99 Методика газохроматографического определения параметров автомобильных бензинов.
2. СТБ 1276-2001 Топлива для двигателей внутреннего сгорания. Бензин неэтилированный. Методика определения параметров.
3. ASTM D 2887-93 Standard Test Method for Boiling Range Distribution of Petroleum Fractions by Gas Chromatography.
4. ГОСТ 6356-75 Нефтепродукты. Метод определения температуры вспышки в закрытом тигле.
5. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2000. Т. 66. С.58.
6. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy. 2000. P.1621.
7. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Химия и технология топлива и масел. 2001. № 4 (508). С. 44.
8. ТУ РБ 14597800.001-98 Система регистрации, обработки и хранения спектрометрической информации ЮНИХРОМ 97. Технические условия.
9. Restek. Каталог хроматографических аксессуаров за 2001 г. С. 26.
10. ГОСТ 3122-67 Топлива дизельные. Метод определения цетанового числа.
11. ГОСТ 2177-99 Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава.
12. ГОСТ 3900-85 Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности.
13. ГОСТ 27768 Топливо дизельное. Определение цетанового индекса расчетным методом.
14. Черепица С. В., Мазаник А. Л. // Тр. междунар. науч.-практ. конф. «Качество-99», 1999 г. С. 146.
15. ГОСТ 305-82 Топливо дизельное. Технические условия.
16. ТУ 38.1011348-99 Топливо дизельное экологически чистое. Технические условия.
17. ТУ 38.401-58-110-94 Топливо дизельное экспортное. Технические условия.
18. ТУ 38.101889-00 Топливо дизельное зимнее ДЗп с депрессорной присадкой. Технические условия.
19. ТУ 38.001355-99 Топливо летнее для дизелей. Технические условия.
20. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Химия и технология топлива и масел. 2003. № 6. С. 45.

DETERMINATION OF THE BASIC INSPECTED DIESEL FUELS PARAMETERS BY GAS CHROMATOGRAPH METHOD

S. V. Charapitsa, S. M. Bychkow, A. M. Kavalenka, A. L. Mazanik,
M. M. Makajed, N. N. Hremiaka*, D. E. Kuzmiankou**, J. L. Luchynina**

Gas chromatograph method for determination of the basic inspected diesel fuels parameters has been developed. In one measurement, that lasts about 140 minutes, concentration of normal paraffins, boiling range distribution, cetane number, density, ignition point of diesel fuel sample could be determined. The method could be used by any manufacturer, contributor, oil refinery or consumers of petrochemicals or petroleum fractions as testing laboratories and petroleum/petrochemicals research organizations.

* Mosyr Refinery, Belarus.

** State Expert Forensic Center of Republic of Belarus.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭТАНОЛА В КАЧЕСТВЕ ВНУТРЕННЕГО СТАНДАРТА ПРИ ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОМ КОЛИЧЕСТВЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ ТОКСИЧНЫХ МИКРОПРИМЕСЕЙ В ВОДКЕ И СПИРТЕ ЭТИЛОВОМ. ОТ ИДЕИ ДО ВНЕДРЕНИЯ В ПОВСЕДНЕВНУЮ ПРАКТИКУ

С. В. Черепица, С. М. Бычков, А. Н. Коваленко, А. Л. Мазаник,
Н. М. Селемина*, О. Б. Серединская**

Правила приемки при изготовлении водки и спирта этилового регламентируют предельное содержание токсичных микропримесей. В соответствии с ГОСТ 5363-93 [1], ГОСТ 5964-93 [2] и ГОСТ Р 51652-2000 [3] нормируется содержание следующих микропримесей: альдегид уксусный (ацетальдегид), этиловый эфир уксусной кислоты (этилацетат), метиловый эфир уксусной кислоты (метилацетат), спирт метиловый (метанол), спирт изопропиловый (2-пропанол), спирт пропиловый (1-пропанол), спирт изобутиловый (2-метил-1-пропанол), спирт бутиловый (1-бутанол), спирт изоамиловый (3-метил-1-бутанол). Аналогичные правила приемки на предельное содержание летучих токсичных микропримесей в алкогольных напитках (spirits drinks) содержатся в нормативных документах ЕС [4].

Правила приемки как в ГОСТ, так и в нормативных документах ЕС, регламентируют предельное содержание в объемных процентах для метанола и в миллиграммах для всех остальных перечисленных выше токсичных микропримесей в пересчете на безводный спирт (absolute alcohol).

Для количественного определения содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом был разработан газохроматографический экспресс-метод по ГОСТ Р 51698-2001 [5]. В соответствии с ГОСТ Р 51698-2001 газохроматографическое определение содержания токсичных микропримесей выполняется по абсолютной градуировке. Метод абсолютной градуировки обладает рядом недостатков.

Во-первых, необходимо приготавливать и в дальнейшем использовать несколько градуировочных смесей. Это влечет за собой приобретение химически особо чистых реактивов. ГОСТ Р 51698-2001 предусматривает приготовление градуировочных смесей этилового спирта с содержанием токсичных примесей на уровне единиц мг на литр безводного спирта методом последовательного разбавления первоначально приготовленных градуировочных смесей с большим, порядка 1000 мг на литр безводного спирта, содержанием исследуемых токсичных примесей. Но приобретение ректификованного этилового спирта с содержанием токсичных примесей менее 1 мг на литр безводного спирта в количестве нескольких литров в месяц представляется весьма проблематичным. Как следствие, все контрольные лаборатории центров сертификации (Госстандарт), центров гигиены и общественного здоровья (Минздрав), спиртзаводы (Минсельхозпрод) вынуждены производить закупки ГСО градуировочных растворов водки и спирта этилового.

* РУП «Минск Кристалл», Беларусь.

** ОАО «Невинномысский Азот», Россия.

Во-вторых, сходимость, воспроизводимость и погрешность результатов измерений сильно зависят от нестабильности работы хроматографа, объема вводимой пробы, нестабильности химического состава ГСО при хранении после первоначального вскрытия ампул.

В-третьих, построение градуировочных таблиц требует значительных трудозатрат. В соответствии с ГОСТ Р 51698 для построения одной градуировочной таблицы на спирт этиловый или водку требуется практически одна рабочая смена, а градуировку необходимо проводить не реже одного раза в две недели.

В соответствии с нормативными документами ЕС [4] газохроматографическое определение содержания токсичных микропримесей в алкогольных напитках (spirits drinks) выполняется с применением метода внутреннего стандарта (ВС). В качестве добавки ВС предлагается использовать pentan-3-ol. Для определения количественного содержания примесей в пересчете на безводный спирт требуется еще провести измерения процентного содержания этилового спирта в испытываемой пробе [4].

Ранее в работах [6–10] была высказана идея о возможности использования основного компонента (растворителя) для количественного определения примесей. На предложенный Институтом ядерных проблем метод получен патент Республики Беларусь № 6801. Для применения нового метода в испытательных и контрольных лабораториях на производстве необходимо провести работу по его практической апробации по возможности максимально широким кругом исследователей в разных лабораториях при работе на разных приборах. Для решения поставленной задачи выбран газохроматографический анализ содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом по ГОСТ Р 51698. Ниже в работе подробно описана процедура использования основного компонента этилового спирта в качестве внутреннего стандарта для определения количественного содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом, представлены разработанные шаблоны обработки измеренных данных. Шаблоны позволяют работать исследователям с различными аналитическими приборами в едином стиле: задавать методические режимы работы прибора, обеспечивать построение абсолютной по ГОСТ Р 51698 и относительной градуировки (относительно этанола), создавать сценарии обработки измеренных хроматограмм, выполнять оперативный контроль качества измерений непосредственно в рабочей программе, в ней же создавать итоговые отчеты в соответствии с руководством по качеству испытательной лаборатории. Предложенные шаблоны позволяют осуществить принцип, когда результаты работы 1-го оператора за 1 смену хранятся в 1 файле. Эти файлы могут переноситься с одного прибора на другой простым копированием, как это делается, например, с документами в формате Microsoft Word. После этого исследователи могут беспрепятственно сравнивать и анализировать как непосредственно измеренные экспериментальные данные, так и результаты обработки, выполненные на разных аналитических приборах в разных лабораториях.

1. Использование этанола в качестве внутреннего стандарта

Хорошо известно, что повышение метрологических характеристик получаемых результатов можно достичь путем использования метода внутреннего стандарта (ВС). Традиционный подход использования ВС в данном случае про-

блематичен. *Во-первых*, необходимо быть заранее уверенным, что вещество, вводимое в качестве ВС, не присутствует изначально в анализируемой смеси. *Во-вторых*, регламентирующие документы предусматривают, чтобы количество вводимой добавки ВС было по порядку величины сравнимо с содержанием искоемых примесей. Но во многих случаях концентрации определяемых примесей составляют тысячные и менее доли процента. Например, ГОСТ 5363-93 на водку и ГОСТ 5964-93 на спирт этиловый регламентирует содержание альдегидов и высших спиртов (сивушные масла) на уровне нескольких миллиграмм на литр безводного спирта, а это составляет порядка десятитысячных процента. Проблематичность выполнения выше указанных требований вынудило разработчиков действующего ГОСТ Р 51698 отказаться от метода ВС и применить метод абсолютной градуировки.

Использование этанола в качестве внутреннего стандарта при хроматографическом количественном определении содержания токсичных микропримесей в водке и этиловом спирте позволяет существенно упростить всю процедуру выполнения измерений, так как отпадает необходимость приготовления градуировочных смесей и устраняется зависимость получаемых результатов относительно нестабильности работы хроматографа и объема вводимой пробы. Отпадает необходимость частых закупок образцов ГСО и проведение частых градуировок прибора.

Необходимо обратить внимание на тот факт, что использование этанола в качестве ВС естественным образом вытекает из требований нормативной документации на контроль качества алкогольной продукции. В правилах приемки на водку по ГОСТ 5363-93 и на спирт этиловый по ГОСТ 5964-93, а также в нормативных документах ЕС [4] содержание токсичных микропримесей нормируется непосредственно в пересчете на безводный спирт. Заметим, что так как вода не регистрируется пламенно-ионизационным детектором, то на измеренной хроматограмме испытуемого образца сразу представлено количественное содержание зарегистрированных микропримесей относительно этанола. Дополнительных измерений, связанных с необходимостью определения процентного объемного содержания этилового спирта в исследуемом образце, как того требует п. 4.5.2. ГОСТ Р 51698, в данном случае уже не требуется.

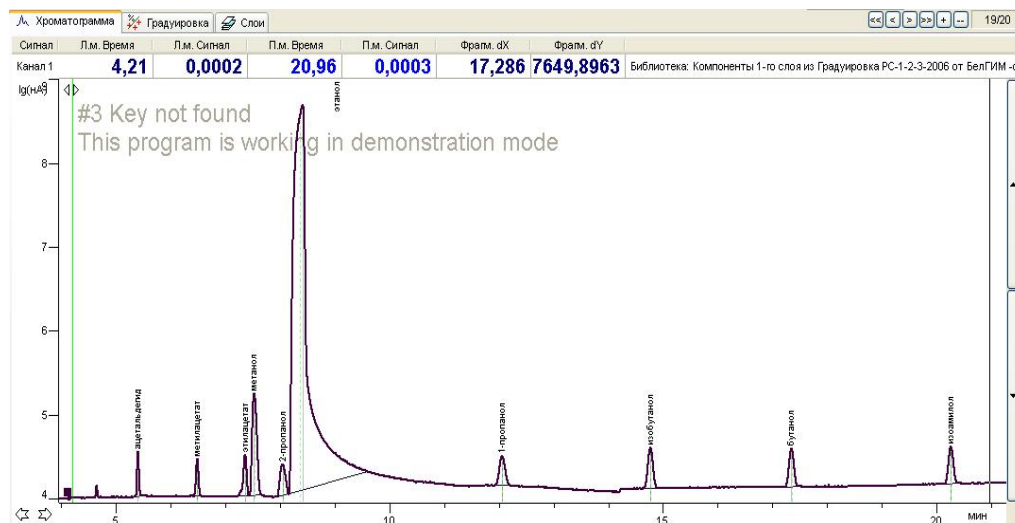
На рисунках 1, а и 1, б представлена экспериментально измеренная хроматограмма ГСО 8404-2003 стандартного образца состава раствора токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РС, образец РС-1). Метрологические характеристики измеренного образца представлены на рис. 2.

Здесь важно обратить внимание производителей стандартных образцов ГСО 8405-2003 и ГСО 8404-2003, что в паспорте указанных ГСО наряду с концентрацией токсичных микропримесей в единицах мг на 1 дм³ водно-спиртового раствора стоит также приводить значения концентраций токсичных микропримесей в единицах мг на 1 дм³ безводного спирта.

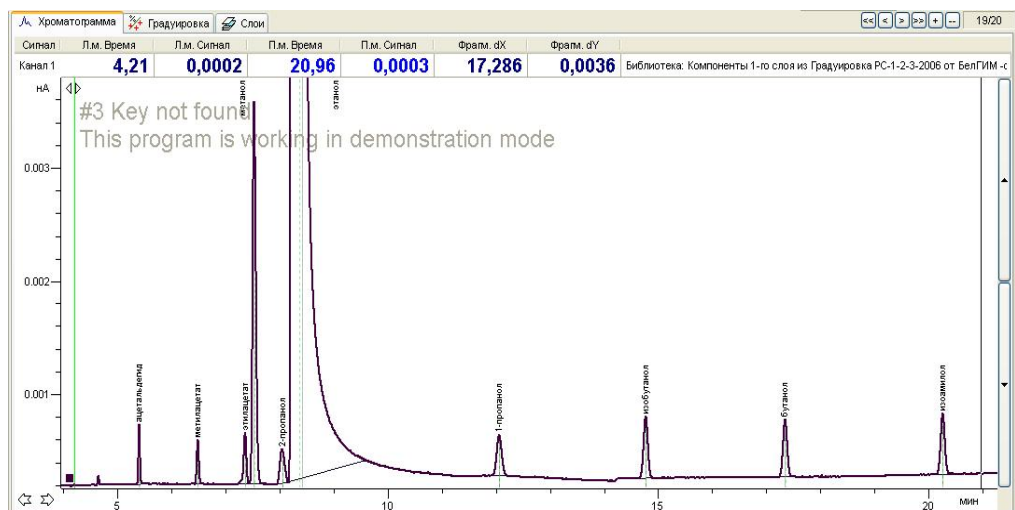
2. Градуировка прибора

Используемый в газовом хроматографе пламенно-ионизационный детектор (ПИД) имеет различающиеся коэффициенты чувствительности к разным компонентам исследуемых смесей. Градуировка хроматографа состоит в нахождении относительных коэффициентов чувствительности детектора к каждому из исследуемых компонентов токсичных микропримесей относительно компонента этилового спирта.

Градуировку хроматографа выполняют по аттестованным градуировочным смесям. В качестве градуировочных смесей можно использовать как ГСО состава растворов токсичных микропримесей в этиловом спирте (комплект РС) или ГСО состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ), так и самостоятельно приготовленные весовым/объемным методом аттестованные смеси.



a



б

Рис. 1. Хроматограмма образца РС-1 из комплекта ГСО 8404-2003: *a* – для представления всех зарегистрированных пиков исследуемых токсичных микропримесей и пика этанола масштаб представления по вертикальной оси выбран логарифмическим, *б* – хроматограмма та же, но представлена в линейном масштабе



1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О ГСО

НАИМЕНОВАНИЕ ГСО: стандартные образцы состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ).

ВЫПУСКАЕТСЯ в соответствии с сертификатом об утверждении типа № 2755, действительным до 22 июля 2008г.

НАЗНАЧЕНИЕ ГСО: градуировка газовых хроматографов и фотоэлектроколориметров при определении содержания токсичных микропримесей в водке; поверка газовых хроматографов, контроль погрешности методики выполнения измерений содержания токсичных микропримесей в водке; аттестация методов выполнения измерений.

РАЗРАБОТЧИКИ ГСО: Государственное научное учреждение "Всероссийский научно-исследовательский институт пищевой биотехнологии" (ГНУ "ВНИИПБТ"). Федеральное государственное унитарное предприятие "Уральский научно-исследовательский институт метрологии" (ФГУП "УНИИМ").

ИЗГОТОВИТЕЛЬ ГСО: ГНУ "ВНИИПБТ".

2 МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГСО партии № 13

2.1 Аттестованные значения СО

Аттестованная характеристика СО	Обозначение единицы физической величины	РВ-1	РВ-2	РВ-3	Относительная погрешность аттестованного значения при $P=0,95$
Массовая концентрация уксусного альдегида (ацетальдегида)	мг/дм ³	8,58	4,28	1,15	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация метилового эфира уксусной кислоты (метилацетата)	мг/дм ³	9,06	4,53	0,91	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация этилового эфира уксусной кислоты (этилацетата)	мг/дм ³	8,83	4,41	0,88	$\pm 5,0 \%$
Объемная доля метилового спирта (метанола)	%	0,0102	0,0053	0,0014	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изопропилового спирта (2-пропанола)	мг/дм ³	8,25	4,27	1,15	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация пропилового спирта (1-пропанола)	мг/дм ³	7,88	3,94	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изобутилового спирта (2-метил-1-пропанола)	мг/дм ³	7,86	3,93	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация бутилового спирта (1-бутанола)	мг/дм ³	7,94	3,97	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изоамилового спирта (3-метил-1-бутанола)	мг/дм ³	7,94	3,97	0,79	$\pm 5,0 \%$

Срок годности экземпляра ГСО: 1 год. Экземпляр СО после вскрытия первоначальной упаковки хранят не более 6 месяцев.

3 ТЕХНИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ. Материал ГСО комплекта РВ представляет собой водно-спиртовую смесь объемной долей этилового спирта 40 %, приготовленную из спирта этилового ректифицированного из пищевого сырья по ГОСТ Р 51652-2000 и дистиллированной воды с внесенными добавками токсичных микропримесей. Материал ГСО расфасован по $(15,0 \pm 0,5)$ см³ в пенициллиновые флаконы вместимостью 20 см³, закрытые полиэтиленовыми крышками, которые герметично покрыты слоем парафина.

4 ПОРЯДОК ПРИМЕНЕНИЯ. ГСО применяют в соответствии с ГОСТ Р 51698-2000, ГОСТ 5363-93, ГОСТ Р ИСО 5725-6-2002, МИ 2651-2001, МИ 2336-2002 и инструкцией по применению.

5 ТРЕБОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ. По степени воздействия на организм этиловый спирт относится к 4 классу опасности по ГОСТ 12.1.007-76. Помещение, в котором проводят работы с ГСО, должно быть оборудовано приточно-вытяжной вентиляцией по ГОСТ 12.4.021-75.

6 КОМПЛЕКТ ПОСТАВКИ: комплект ГСО, паспорт ГСО.

7 СВИДЕТЕЛЬСТВО О ПРИЕМКЕ

Дата выпуска ГСО партии № 13 01.09.2006

Контролер

Т.М. Шелехова Т.М. Шелехова

8 УСЛОВИЯ ТРАНСПОРТИРОВАНИЯ И ХРАНЕНИЯ. ГСО следует хранить в холодильнике при температуре от 4 °С до 10 °С. ГСО можно перевозить всеми видами транспорта. В качестве транспортной тары должны быть использованы коробки из картона или пенопласта. Упаковка с ГСО не должна подвергаться резким ударам, воздействию атмосферных осадков и агрессивных химических веществ.

9 ГАРАНТИЙНЫЕ ОБЯЗАТЕЛЬСТВА. Изготовитель гарантирует стабильность аттестованных значений в течение срока годности экземпляра ГСО при соблюдении условий хранения, транспортирования и порядка применения.

10 ПРИЛОЖЕНИЕ. Инструкция по применению ГСО.

Директор ГНУ "ВНИИПБТ"



В.А. Поляков

В.А. Поляков

Рис. 2. Типовой паспорт ГСО 8405-2003 на стандартные образцы состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ) от ГНУ «ВНИИПБТ», г. Москва. Курсивом представлены концентрации токсичных микропримесей в мг/дм³ в пересчете на безводный спирт в предположении, что объемная концентрация этанола в данных водно-спиртовых растворах составляет 40 %. Как того требуют приемочные ГОСТ 5363-93, ГОСТ 5964-93 и ГОСТ Р 51652-2000

Записывают хроматограммы анализа каждой градуировочной смеси. Регистрируют время удерживания и площади пиков определяемых веществ. Измерения выполняют не менее двух раз. Градуировочную характеристику получают, обрабатывая полученные экспериментальные данные методом наименьших квадратов.

Численные значения относительных коэффициентов отклика детектора K_i получают из хроматографических данных ГСО (аттестованных смесей) с известными концентрациями этанола и исследуемых примесей:

$$K_i = \frac{S_{Et}^{cert} \cdot X_i^{cert}}{S_i^{cert} \cdot X_{Et}^{cert}}, \quad (1)$$

где S_i^{cert} и S_{Et}^{cert} – площади пиков i -го компонента и этанола соответственно, X_i^{cert} и X_{Et}^{cert} – концентрации i -го компонента и этанола соответственно.

Концентрация C_i [мг/л], в пересчете на безводный спирт, i -го компонента в пробе описывается следующим выражением:

$$C_i = \frac{K_i \cdot S_i \cdot C_{Et}}{S_{Et}}, \quad (2)$$

где S_i и S_{Et} – площади пиков i -го компонента и этанола соответственно, K_i – коэффициент относительного отклика детектора для i -го компонента, C_{Et} – концентрация этанола в мг/л, в пересчете на безводный спирт. При нормальных условиях $C_{Et} = 789300$ мг/л.

Полученные в результате проведенных экспериментальных исследований относительные коэффициенты чувствительности представлены в табл. 1. Испытания данного ГСО РВ были выполнены 18-06-2007 в лаборатории РУП «БелГИМ», 21-06-2007 в лаборатории РУП «Витебский ЛВЗ» и 29-05-2007 в лаборатории РУП «Брестский ЛВЗ». Необходимо обратить внимание на то, что имена операторов неизвестны, также неизвестны режимы работы хроматографов и объемы вводимой пробы в инжектор. Размерность коэффициента чувствительности абсолютного в данном случае имеет следующий вид [(mg/L)/(pA×min)].

Метанол и этанол обладают относительно близкими физико-химическими свойствами. И в то же время экспериментально измеренные ОСКО K_i для метанола заметно больше, чем, например, ОСКО K_i ацетальдегидов и эфиров, не говоря уже о ОСКО K_i для всех остальных определяемых высших спиртов.

Анализ полученных экспериментальных данных указывает на то, что испытанные образцы имели различный количественный состав, хотя паспорта были выписаны одинаковые. Для выяснения причины выявленных расхождений необходимо провести серию межлабораторных сличительных испытаний МСИ аттестованной смеси, но разлитой из одной емкости.

Таблица 1

Результаты экспериментальных исследований по определению относительных коэффициентов чувствительности одной партии ГСО 8405-2003.

Дата выпуска партии 15 от 22-03-2007

Дата выпуска партии 15.01.22 65 2007

Компонент ГСО 8405- 2003	Коэффициенты чувствительности K_i и K_{abs}								ОСКО, %
	РУП «БелГИМ»		РУП «ВитЛВЗ»		РУП «БрестЛВЗ»		Средние значения		
	K_{abs}	K_i	K_{abs}	K_i	K_{abs}	K_i	$\langle K_{abs} \rangle$	$\langle K_i \rangle$	
Альдегид ук- сусный (аце- тальдегид)		1.628		1.734		1.730		1.698	3.6
Метилловый эфир уксусной кислоты (ме- тилацетат)		1.530		1.641		1.552		1.574	3.7
Этиловый эфир уксусной кислоты (этилацетат)		1.035		1.108		1.033		1.058	4.1
Спирт мети- ловый (мета- нол)		1.220		1.292		1.349		1.287	5.0
Спирт этило- вый (этанол)	703		761		773		746		5,0
Спирт изо- пропиловый (2-пропанол)		1.015		1.003		1.022		1.014	0.9
Спирт пропи- ловый (1-пропанол)		0.719		0.729		0.737		0.728	1.2
Спирт изобу- тиловый (2-метил-1- пропанол)		0.542		0.540		0.533		0.538	0.9
Спирт бутило- вый (1-бутанол)		0.604		0.599		0.613		0.605	1.2
Спирт изоами- ловый (3-метил- 1-бутанол)		0.578		0.574		0.591		0.581	1.6

3. Анализ образца

В испаритель (инжектор) микрошприцем вместимостью 10, 5 или 1 мм³ вводят 1 мм³ образца водки или спирта и выполняют хроматографическое разделение смеси. Регистрируют пики в области времени удерживания, соответствующего каждому веществу градуировочной смеси. Образец анализируют два

раза в условиях повторяемости в соответствии с требованиями ИСО5725-1. За результат измерений принимают среднеарифметическое значение двух параллельных определений массовой концентрации i -го вещества, полученных в условиях повторяемости, если выполняется условие приемлемости по формуле

$$\frac{2|C_{i1} - C_{i2}| \cdot 100}{(C_{i1} + C_{i2})} \leq r_i, \quad (3)$$

где C_{i1}, C_{i2} – результаты параллельных определений массовой концентрации i -го вещества в анализируемой пробе, мг/дм³, 100 – множитель для пересчета в процентах; r_i – предел повторяемости для i -го вещества.

Если условие приемлемости по формуле (3) не выполняется, выясняют причины превышения предела повторяемости, устраняют их и повторяют выполнение измерений.

Для перевода концентрации метилового спирта в единицы объемных процентов на литр безводного этилового спирта необходимо полученное значение концентрации метилового спирта, выраженное в мг/дм³, разделить на величину объемной плотности метилового спирта в соответствии со следующим выражением:

$$X_{Me} [\%] = C_{Me} [\text{мг/дм}^3] / \rho_{Me} [\text{мг/дм}^3] * 100 \%, \quad (4)$$

где величина объемной плотности метилового спирта ρ_{Me} равна 792800 мг/дм³.

Примеры представления выполненных измерений представлены на рис. 3, 4. В закладке **Калькулятор** ПО UniChrom в столбце **Е** отображаются полученные значения сходимости по двум измерениям в столбцах **В** и **С**. В столбце **Г** отображается значение критерия полученной сходимости. В столбцах **Ж**, **З** и **И** представлены результаты контроля погрешности выполненных измерений. Для малых концентраций исследуемых примесей спиртовых растворов РС-3 довольно часто имеют место неудовлетворительные критерии сходимости и погрешности измерений исследуемых примесей спиртовых растворов РС-3 довольно часто имеют место неудовлетворительные критерии сходимости и погрешности измерений.

4. Заключение

Предложенный метод может быть использован в контрольных лабораториях любых производителей, поставщиков и потребителей алкогольной продукции, в центрах стандартизации и метрологии, центрах гигиены, санитарии и общественного здоровья, в экспертно-криминалистических лабораториях по исследованию алкогольной продукции.

Важно отметить, что предложенный методический подход может быть использован в многочисленных газохроматографических анализах по определению количественного содержания микропримесей в основном веществе. Например, входной и выходной контроль количественного содержания примесей в метаноле, бутаноле, пропаноле, амилале, гексане, гептане, декане, бензоле [11, 12], толуоле [13], ксилоле [14–17], акрилонитриле [18], винилацетате и т. д. Целое семейство стандартов на определение примесей в органических соединениях.

В связи с разработкой и внедрением широкодиапазонного детектора по теплопроводности (катарометр) появляется возможность реализовать газохроматографические измерения по определению количественного компонентного состава природного горючего газа не по абсолютной градуировке, как того требуют действующие ГОСТ 23781 [19] и ISO 6974 [20], а использовать основной компонент метан в качестве внутреннего стандарта.

Литература

1. ГОСТ 5363-93 Водка. Правила приемки и методы анализа.
2. ГОСТ 5964-93 Спирт этиловый. Правила приемки и методы анализа.
3. ГОСТ Р 51652-2000 Спирт этиловый ректификованный из пищевого сырья. Технические условия.
4. Commission Regulation EC 2870-2000. Determination of Volatile Substances and Methanol of Spirit Drinks. No 1576/89.
5. ГОСТ Р 51698-2001 Водка и спирт этиловый из пищевого сырья. Газохроматографический экспресс-метод определения содержания токсичных микропримесей.
6. Charapitsa S. V., Bychkov S. M. и др. // Abstracts of Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy. 2003. № 1480P. P. 526.
7. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Журнал аналитической химии. 2003. Т. 58, № 4. С. 416.
8. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Партнеры и конкуренты. 2004. № 8. С. 35.
9. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Партнеры и конкуренты. 2006. № 2. С. 23.
10. Бычков С. М., Коваленко А. Н. и др. // Тезисы докладов XVIII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Москва. 2007 г. С. 98.
11. ГОСТ 2706.2-95 Углеводороды ароматического ряда. Хроматографический метод определения основного вещества и примесей в бензоле, толуоле и ксилоле.
12. ASTM D 4492-03 Standard Test Method for Analysis of Benzene by Gas Chromatography.
13. ISO 5279-1980 Toluene for industrial use. Determination of impurities. Gaschromatographic method.
14. UOP 543-97 Trace Non-Aromatic Hydrocarbons in High-Purity Aromatics by Gas Chromatography.
15. UOP 720-93 Impurities in high purity p-xylene by GC.
16. UOP 798-96 Trace p-DEB or indan in C8 aromatics and trace C8 aromatics in p-DEB by GC.
17. ASTM D 3798-03 Standard Test Method for Analysis of p-Xylene by Gas Chromatography.
18. ASTM E 1863-97 Standard Test Method for Analysis of Acrylonitrile by Gas Chromatography.
19. ГОСТ 23781-87 Газы горючие природные. Хроматографический метод определения компонентного состава.
20. ISO 6974-6:2002 Natural gas. Determination of composition with defined uncertainty by gas chromatography. Determination of hydrogen, helium, oxygen, nitrogen, carbon dioxide and C1 to C8 hydrocarbons using three capillary columns.

THE BASIC COMPONENT (SOLVENT) AS THE INTERNAL STANDARD IN THE CHROMATOGRAPHIC QUANTITY DETERMINATION OF IMPURITIES

S. V. Charapitsa, S. M. Bychkov, A. N. Kovalenko, A. L. Mazanik,
N. M. Selezmina*, O. B. Seredinskaya**

The method of the chromatographic quantity determination of impurities using the basic component (solvent) as internal standard is proposed. The analysis of the experimental data measured in the accredited laboratories of the Minsk, the Gomel and the Brest winery and distillery "Krystal" (Belarus) show the high metrology characteristics of the proposed method.

* RUE "Minsk Krystal", Belarus.

** LLC "Nevinnomyssk Azot", Russia

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ	
<i>Барышевский В. Г., Ровба А. А.</i> Двухлучепреломление и спиновый дихроизм дейтронов в нуклонной мишени в области энергий 5–20 МэВ.....	8
<i>Барышевский В. Г., Ширвель А. Р.</i> Осцилляции спина и спиновый дихроизм дейтронов, вращающихся в накопительном кольце.....	18
<i>Силенко А. Я.</i> Тензорная электрическая поляризуемость дейтрона в экспериментах в накопительных кольцах.....	25
<i>Силенко А. Я.</i> Динамика спина в экспериментах по поиску электрических дипольных моментов частиц, проводимых в накопительных кольцах.....	47
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л.</i> Чувствительность нейтронного кристалл-дифракционного эксперимента к электрическому дипольному моменту нейтрона и Р-, Т-нечетным ядерным силам.....	71
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л., Мацукевич Д. Н.</i> Использование лазера, помещенного в аксиальное электрическое поле, для поиска нарушения Р-, Т-инвариантности.....	79
<i>Тихомиров В. В., Малышиц В. В., Сягло С. Э., Целков Ю. А.</i> О возможностях исследования начальной стадии эволюции Вселенной.....	96
<i>Веренич К. А., Калашиников В. Л., Черкас С. Л.</i> Квантовая механика замкнутой коллапсирующей Вселенной.....	111
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА ЧАСТИЦ И ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ	
<i>Коржик М. В., Качанов В. А., Анненков А. Н., Мисевич О. В., Федоров А. А.</i> Сцинтилляционные кристаллы вольфрамата свинца для точной электромагнитной калориметрии на ускорителях с высокой светимостью.....	118
<i>Дорменев В. И., Дробышев Г. Ю., Коржик М. В., Мисевич О. В.</i> Электромагнитный калориметр на основе кристаллов вольфрамата свинца для эксперимента PANDA (GSI, Германия).....	127
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Войтик О. Л., Делендик К. И.</i> Источник позитрониев на основе анодного оксида алюминия для эксперимента по измерению массы антиводорода.....	132
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Дорменев В. И., Коржик М. В., Корнеев А. Е., Мечинский В. А.</i> Применение кристаллов PWO в компенсированных гибридных калориметрах для экспериментальной физики высоких энергий.....	140
<i>Гниненко С. Н., Дробышев Г. Ю., Кирсанов М. М., Корнеев А. Е., Красников Н. В., Матвеев В. А.</i> Поиск тяжелого нейтрино в эксперименте CMS на LHC.....	151
<i>Барышевский В. Г., Батраков К. Г., Грубич А. О., Гуринович А. А., Лобко А. С., Ровба А. А., Сафронов П. Ф., Столярский В. И., Тарнопольский Б. А., Ульяненок А. П., Феранчук И. Д.</i> Когерентное тормозное и параметрическое рентгеновское излучение нерелятивистских электронов (КТПРИ).....	156
<i>Etjore G., Агафонов С. И., Грубич А. О., Лобко А. С., Лаптев А. И., Лопатик А. Р., Кутень С. А., Хрущинский А. А.</i> Подводный спектрометр для системы мониторинга нейтринного телескопа KM3NeT.....	175
ЭЛЕКТРОДИНАМИКА НАНОСТРУКТУР	
<i>Максименко С. А., Слепян Г. Я., Батраков К. Г., Кузир П. П., Мадьяров А. В., Немиленцев А. М., Хрущинский А. А., Шуба М. В.</i> Электромагнитные волны в наноструктурах.....	180

Бондарев И. В. Квантово-электродинамические явления в атомно-допированных углеродных нанотрубках	213
Хрущинский А. А., Пушкарьчук А. Л., Кутень С. А., Килин С. Я., Низовцев А. П. Исследование механических параметров уединенных углеродных нанотрубок методами молекулярной динамики.....	228
Мадьяров А. В. Процессы взаимодействия квантовой точки с электромагнитными полями.....	239
Немиленцев А. М. Плотность фотонных состояний вблизи однослойной углеродной нанотрубки конечной длины.....	247

ПРИКЛАДНАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

Барышевский В. Г., Белоус Н. А., Гуринович А. А., Евдокимов В. А., Лобко А. С., Молчанов П. В., Оськин А. В., Столярский В. И. Экспериментальное исследование объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором.....	251
Барышевский В. Г., Гуринович А. А. Электродинамические свойства объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором с переменными параметрами	261
Сытова С. Н. Первые шаги в исследовании хаотической динамики объемных лазеров на свободных электронах.....	270
Карпович В. А., Слепян Г. Я., Родионова В. Н., Волюнец Г. И., Савук А. А., Танана О. В., Гринчук И. А. Электродинамика специальных высокочастотных резонансных систем и микроволновые технологии.....	290

МАГНИТНАЯ КУМУЛЯЦИЯ ЭНЕРГИИ

Барышевский В. Г., Гуринович А. А. Влияние радиационных потерь на процесс излучения в системе «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка»	321
Сытова С. Н., Тихомиров В. В., Черкас С. Л. Одномерная и двумерная модели спирального магнитокумулятивного генератора: численный анализ и сравнение с экспериментом.....	327

МЕТОДЫ АНАЛИЗА СОСТАВА ВЕЩЕСТВА

Дойников А. А. Пространственно-временная динамика микропузырьковых контрастных агентов в ультразвуковых полях.....	336
Shekhtman A. Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
Кутень С. А., Хрущинский А. А., Миненко В. Ф., Кухта Т. С. Использование Монте-Карло моделирования для оценки дозовых нагрузок на органы и ткани пациента во время рентгенологических исследований.....	359
Иванов В. И., Лазарчик А. Н. Концепция, задачи и результаты создаваемой сети компьютерного цитогенетического мониторинга населения Республики Беларусь в постчернобыльский период	379
Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Макоед Н. М., Гремяко Н. Н., Кузменков Д. Е., Лучинина Я. Л. Определение инспектируемых параметров дизельного топлива методом газовой хроматографии.....	392
Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Селемина Н. М., Серединская О. Б. Использование этанола в качестве внутреннего стандарта при газохроматографическом количественном определении содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом. От идеи до внедрения в повседневную практику.....	402

CONTENTS

INTRODUCTION.....	5
FUNDAMENTAL PROBLEMS OF NUCLEAR AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Baryshevsky V. G., Rouba A. A.</i> Birefringence and spin dichroism for deuterons with energy 5 – 20 MeV in nucleon target.....	8
<i>Baryshevsky V. G., Shyrvel A. R.</i> Spin oscillations and spin dichroism (the birefringence effect) of deuterons rotating in a storage ring	18
<i>Silenko A. J.</i> Tensor electric polarizability of the deuteron in storage-ring experiments.....	25
<i>Silenko A. J.</i> Spin dynamics in experiments on a search for electric dipole moments of particales, performed in storage rings.....	47
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L.</i> Sensitivity of the neutron crystal diffraction experiment to the neutron EDM and to the nuclear P-T-violating forces	71
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L. , Matsukevich D. N.</i> Laser in axial electric field as a tool to search for P-, T- invariance violation.	79
<i>Tikhomirov V. V., Malyshchits V. V., Siahlo S. E., Tsalkou Yu. A.</i> On the possibility of investigation of the first stage of the Universe evolution	96
<i>Verenich K. A., Kalashnikov V. L., Cherkas S. L.</i> Quantum mechanics of a closed collapsing Universe.....	111
EXPERIMENTAL HIGH ENERGY AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Korzhik M. V., Kachanov V. A., Annenkov A. N., Missevitch O. V., Fedorov A. A.</i> Lead tungstate scintillation crystals for precise electromagnetic calorimetry on high luminosity accelerators.....	118
<i>Dormenev V. I., Drobychev G. Yu., Korzhik M. V., Missevitch O. V.</i> Electromagnetic calorimeter based on the lead tungstate crystals for the PANDA experiment (GSI, Germany).....	127
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Voitik O. L., Delendik K. I.</i> Positronium source on a basis of anodic aluminum oxide for the experiment on a anti-hydrogen mass measurements.....	132
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Dormenev V. I., Korjik M. V., Karneyeu A. E., Mechinsky V. A.</i> Application of PWO crystals for construction of compensated hybrid calorimeters for experimental high energy physics.....	140
<i>Gninenko S. N., Drobychev G. Yu., M. Kirsanov M. M. , Korneev A. E., Krasnikov N. V., Matveev V. A.</i> Search for heavy neutrino on CMS experiment at LHC.....	151
<i>Baryshevsky V. G., Bartrakov K. G., Grubich A. O., Gurinovich A. A., Lobko A. S., Rouba A. A., Safronov P. F., Stolyarsky V. I., Tarnopolsky B. A., Ulyanenko A. P., Feranchuk I. D.</i> Coherent bremsstrahlung and parametric x-rays (CB&PXR) from non-relativistic electrons.....	156
<i>Etiopie G., Agafonov S. I., Grubich A. O., Lobko A. S., Laptev A. I., Lopatik A. R., Kuten S. A., Khruschinsky A. A.</i> Underwater spectrometer for monitoring system of KM3NeT neutrino telescope.....	175
ELECTRODYNAMICS OF NANOSTRUCTURES	
<i>Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya., Batrakov K. G., Kuzhir P. P., Magyarov A. V., Nemilentsau A. M., Khrutchinski A. A., Shuba M. V.</i> Electromagnetic waves in nanostructures.....	180

Bondarev I. V. Quantum electrodynamic phenomena in atomically doped carbon nanotubes.....	213
Khrutchinsky A. A., Pushkarchuk A. L., Kuten S. A., Kilin S. Ja., Nizovtsev A. P. Research of mechanical parameters of individual carbon nanotubes by methods of the molecular dynamic.....	228
Magyarov A. V. The local field influence on signatures of excitonic Rabi oscillations in an isolated quantum dot driven by the coherent light field	239
Nemilentsau A. M. Photonic density of states in the vicinity of the single-wall finite-length CNT	247

APPLIED ELECTRODYNAMICS

Baryshevsky V. G. , Belous N. A., Gurinovich A. A., Evdokimov V. A., Lobko A. S., Molchanov P. V., Oskin A. V., Stolyarsky V. I. Experimental study of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator.....	251
Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A. Electrodynamical properties of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator with variables parameters.....	261
Sytova S. N. First steps in investigation of chaotic dynamics in Volume Free Electron Laser.....	270
Karpovich V. A., Slepyan G. Ya., Rodionova V. N., Volinets G. I., Savuk A. A., Tanana O. V., Grinchuk I. A. Electrodynamics of special high-quality resonance systems and microwave technologies.....	290

MAGNETIC FIELDS CUMULATION

Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A. Influence of radiative losses on the oscillation processes in the circuit "flux compression generator – capacitive load".....	321
Sytova S. N., Tikhomirov V. V., Cherkas S. L. One-dimensional and two-dimensional models of the helical flux compression generator: numerical analysis and comparison with experiment.....	327

METHODS OF MATTER ANALYSIS

Doinikov A. A. Spatio-temporal dynamics of microbubble contrast agents in ultrasound fields.....	336
Shekhtman A. Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
Kutsen S. A., Khrutchinsky A. A., Minenko V. F., Kuhta T. S. Implementation of Monte carlo simulations for assessment of dose burdens on the tissues and organs of patients during diagnostic x-ray investigations	359
Ivanov V. I., Lazarchik A. N. Conception, tasks and results of constructing computer system of cytogenetic monitoring of population of Republic of Belarus in the postchernobyl period.....	379
Charapitsa S. V., Bychkow S. M., Kavalenka A. M., Mazanik A. L., Makajed M. M., Hremiaka N. N., Kuzmiankou D. E., Luchynina J. L. Determination of the basic inspected diesel fuels parameters by gas chromatograph method.....	392
Charapitsa S. V., Bychkov S. M., Kovalenko A. N., Mazanik A. L., Selezmina N. M., Seredinskaya O. B. The basic component (solvent) as the internal standard in the chromatographic quantity determination of impurities.....	402

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

В авторской редакции

Технический редактор *Г. М. Романчук*
Корректор *Н. П. Ракицкая*
Компьютерная верстка *С. Н. Сытовой*
Ответственный за выпуск *А. Г. Купцова*

Подписано в печать 22.05.2009. Формат 70×100/16. Бумага офсетная.
Гарнитура Таймс. Печать офсетная. Усл. печ. л. 31,95.
Уч.-изд. л. 25,23. Тираж 200 экз. Зак.

Белорусский государственный университет.
ЛИ № 02330/0494425 от 08.04.2009.
220030, Минск, проспект Независимости, 4.

Отпечатано с оригинала-макета заказчика.
Производственное республиканское унитарное предприятие
«Минсктиппроект».
ЛП № 02330/0494102 от 11.03.2009.
220123, Минск, ул. В. Хоружей, 13/61.