

ВЕСЦІ НАЦЫЯНАЛЬнай АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ

СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК. 2020. Т. 56, № 4

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

СЕРИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК. 2020. Т. 56, № 4

Журнал основан в 1965 г. как «Весці Акадэміі навук БССР. Серыя фізіка-матэматычных навук»,
с 1992 г. – «Весці Акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук»,
с 1998 г. – современное название

Выходит четыре раза в год

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,
свидетельство о регистрации № 392 от 18.05.2009

Издается при поддержке Белорусского физического общества

*Входит в Перечень научных изданий Республики Беларусь
для опубликования результатов диссертационных исследований,
включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ)*

Главный редактор

Сергей Яковлевич Килин – Президиум Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

Редакционная коллегия

- Н. М. Олехнович** – Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь (*заместитель главного редактора*)
В. А. Орлович – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь (*заместитель главного редактора*)
Т. Е. Янчук – (*ведущий редактор журнала*)
С. В. Абламейко – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
С. М. Абрамов – Институт программных систем Российской академии наук, Москва, Россия
В. М. Анищик – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
А. И. Белоус – Холдинг «ИНТЕГРАЛ», Минск, Беларусь
С. В. Гапоненко – Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований, Минск, Беларусь
В. В. Гороховик – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
Н. А. Изобов – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
Н. С. Казак – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
В. И. Корзюк – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

- Ф. П. Коршунов** – Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь
- Ю. А. Курочкин** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- В. А. Лабунов** – Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь
- С. В. Лемешевский** – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Д. С. Могилевцев** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Н. А. Поклонский** – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
- С. А. Тихомиров** – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Л. М. Томильчик** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- А. В. Тузиков** – Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Ю. С. Харин** – Научно-исследовательский институт прикладных проблем математики и информатики Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь
- А. Ф. Чернявский** – Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь
- Л. А. Янович** – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- В. И. Янчевский** – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

Редакционный совет

- С. Я. Килин** – Президиум Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- С. В. Абламейко** – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
- А. Л. Асеев** – Президиум Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия
- В. Г. Бондур** – Российская академия наук, Москва, Россия
- Й. Врахтруп** – Институт физики (3) Штутгартского университета, Штутгарт, Германия
- Ф. Б. Железко** – Институт квантовой оптики Университета Ульма, Ульм, Германия
- А. М. Желтиков** – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия
- В. В. Козлов** – Математический институт имени В. А. Стеклова Российской академии наук, Москва, Россия
- Г. Лёйхс** – Институт физики света имени М. Планка, Эрланген, Германия
- Д. С. Могилевцев** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Нгуен Дай Хунг** – Институт физики Вьетнамской академии наук и технологий, Ханой, Вьетнам
- В. А. Орлович** – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- Стивен Чу** – Стэнфордский университет, Стэнфорд, Калифорния, США
- А. Цайлингер** – Институт квантовой оптики и квантовой информатики Австрийской академии наук, Вена, Австрия

Адрес редакции:

ул. Академическая, 1, к. 118, 220072, г. Минск, Республика Беларусь.

Тел.: + 375 17 374-02-45; e-mail: fmvesti@mail.ru

vestifm.belnauka.by

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ.

Серия физико-математических наук. 2020. Т. 56, № 4.

Выходит на русском, белорусском и английском языках

Редактор *Т. Е. Янчук*

Компьютерная верстка *И. В. Счеснюк*

Подписано в печать 18.12.2020. Выход в свет 29.12.2020. Формат 60×84^{1/8}. Бумага офсетная.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 16,4. Тираж 62 экз. Заказ 220.

Цена: индивидуальная подписка – 12,32 руб., ведомственная подписка – 29,31 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220141, г. Минск, Республика Беларусь

© РУП «Издательский дом «Беларуская навука»,

Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук, 2020

PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

PHYSICS AND MATHEMATICS SERIES, 2020, vol. 56, no. 4

The Journal was founded in 1956 under the titles “Proceedings of the Academy of Sciences of BSSR. Physics and Mathematics Series”, since 1992 – “Proceedings of the Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics Series”, since 1998 – it comes under its actual title

Periodicity is 4 issues per annum

Founder is the National Academy of Sciences of Belarus

The journal is registered on May 18, 2009 by the Ministry of Information of the Republic of Belarus in the State Registry of Mass Media, reg. no. 392

It is published with support of the Belarusian Physical Society

The Journal is included in The List of Journals for Publication of the Results of Dissertation Research in the Republic of Belarus and in the database of Russian Science Citation Index (RSCI)

Editor-in-Chief

Sergei Ya. Kilin – Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Editorial Board

Nikolai M. Olekhovich – The Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus (*Associate Editor-in-Chief*)

Valentin A. Orlovich – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus (*Associate Editor-in-Chief*)

Tatiana E. Yanchuk (*lead editor*)

Sergey V. Ablameyko – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Sergei M. Abramov – Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Viktor M. Anishchik – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Anatoliy I. Belous – “INTEGRAL” Holding, Minsk, Belarus

Sergey V. Gaponenko – Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research, Minsk, Belarus

Valentin V. Gorokhovik – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Nikolai A. Izobov – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Nikolai S. Kazak – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Viktor I. Korzyuk – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Fyodor P. Korshunov – The Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Yurii A. Kurochkin – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Vladimir A. Labunov – Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

Sergey V. Lemeshevsky – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Dmitrii S. Mogilevcev – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Nikolai A. Poklonski – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Sergei A. Tikhomirov – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Lev M. Tomil'chik – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Aleksandr V. Tuzikov – United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Yurii S. Kharin – Research Institute for Applied Problems of Mathematics and Informatics of the Belarusian State University, Minsk, Belarus
Aleksandr F. Chernyavskii – A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus
Leonid A. Yanovich – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Vyacheslav I. Yanchevskii – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Editorial Council

Sergei Ya. Kilin – Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Sergei V. Ablameyko – Belarusian State University, Minsk, Belarus
Aleksandr L. Aseev – Presidium of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
Valery G. Bondur – Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
Jörg Wrachtrup – Institute of Physics (3) of the University of Stuttgart, Stuttgart, Germany
Fedor B. Jelezko – Institute for Quantum Optics of the Ulm University, Ulm, Germany
Aleksei M. Zheltikov – Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
Valery V. Kozlov – Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
Gerd Leuchs – Max Planck Institute for the Science of Light, Erlangen, Germany
Dmitrii S. Mogilevcev – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Nguyen Dai Hung – Institute of Physics of the Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam
Valentin A. Orlovich – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Steven Chu – Stanford University, Stanford, California, USA
Anton Zeilinger – Institute for Quantum Optics and Quantum Information of the Austrian Academy of Sciences, Vienna, Austria

Address of the Editorial Office:
1, Akademicheskaya Str., room 118, 220072, Minsk, Republic of Belarus.
Tel.: +375 17 374-02-45; e-mail: fmvesti@mail.ru
vestifm.belnauka.by

PROCEEDING OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS.

Physics and Mathematics series, 2020, vol. 56, no. 4.

Printed in Russian, Belarusian and English languages

Editor *T. E. Yanchuk*
Computer imposition *I. V. Schasniuk*

It is sent of the press 18.12.2020. Appearance 29.12.2020. Format 60×84¹/₈. Offset paper.
The press digital. Printed pages 14,88. Publisher's signatures 16,4. Circulation 62 copies. Order 220.
Price: individual subscription – 12,32 byn., departmental subscription – 29,31 byn.

Publisher and printing execution:

Republican unitary enterprise "Publishing House "Belaruskaya Navuka".
Certificate on the state registration of the publisher, manufacturer, distributor of printing editions
No. 1/18 dated August 2, 2013. License for the press no. 02330/455 dated December 30, 2013.
Address: F. Scorina Str., 40, 220141, Minsk, Republic of Belarus.

© RUE "Publishing House "Belaruskaya Navuka",
Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series, 2020

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Деменчук А. К. Достаточное условие неразрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с диагональным усреднением коэффициентной матрицы.....	391
Бенедиктович В. И. Главные собственные значения графа и его гамильтоновость	398
Найденко В. Г. Топология частичной выпуклости	408

ФИЗИКА

Поклонский Н. А., Сягло А. И., Вырко С. А., Раткевич С. В., Власов А. Т., Лозовик Ю. Е., Нгуен Нгок Хиену. Геометрия двухслойного нанорулона из zigzag нанополосок графена и нитрида бора.....	411
Войнова Я. А., Крылова Н. Г., Овсюк Е. М. Паулиевское приближение для векторной частицы с аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле	419
Шершень И. А., Шишкина Т. В. Современные методы расчета тормозного излучения в процессах взаимодействия элементарных частиц	436
Василевская Д. С., Григорьев Д. Н., Дудко И. Г., Иванов В. Л., Казанин В. Ф., Козырев А. Н., Рубан А. А., Рыжененков А. Е., Толмачев С. С., Федотович Г. В., Шемякин Д. Н., Шёлковский Д. В., Эпштейн Л. Б. Изучение процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ с детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000.....	449
Чулков Р. В., Корожан О. П., Орлович В. А. Статистика флуктуаций энергий импульсов генерации твердотельного лазера на вынужденном комбинационном рассеянии.....	459
Барбарчик Е. А., Буганов О. В., Замковец А. Д., Тихомиров С. А., Фан Вьет Тип, Фам Хон Мынь. Спектрально-кинетические свойства нестационарного поглощения гибридных наноструктур серебро-фталоцианин меди	470
Толкачева Е. А., Маркевич В. П., Мурын Л. И. Локальные колебательные моды вакансионно-кислородных комплексов в кристаллическом кремнии при комнатной температуре.....	480
Якушевич А. С., Богатырев Ю. В., Василенков Н. А., Грабчиков С. С., Ластовский С. Б., Максимов А. Ю. Ослабление потоков электронов радиационных поясов Земли защитными экранами на основе композита W-Cu	488
Батяновский А. В., Намиот В. А., Филатов И. В., Туманян В. Г., Есипова Н. Г., Волоотовский И. Д. Фурье-преобразование в сферических системах координат как инструмент решения задач структурной биологии	496

УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ

Казак Николай Станиславович (К 75-летию со дня рождения).....	504
Перечень статей, опубликованных в журнале «Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук» в 2020 году	507

CONTENTS

MATHEMATICS

Demenchuk A. K. A sufficient condition for the unsolvability of the control problem of the asynchronous spectrum of linear almost periodic systems with the diagonal averaging of the coefficient matrix	391
Benediktovich V. I. Main eigenvalues of a graph and its Hamiltonicity	398
Naidenko V. G. Topology of directional convexity.....	408

PHYSICS

Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Vlassov A. T., Lozovik Yu. E., Hieu Nguyen Ngoc. The geometry of a bilayer nanoscroll rolled from zigzag nanoribbons of graphene and boron nitride.....	411
Voynova Ya. A., Krylova N. G., Ovsyuk E. M. Pauli approximation for a vector particle with anomalous magnetic moment in an external Coulomb field.....	419
Shershan I. A., Shishkina T. V. Modern methods of calculations of bremsstrahlung in the interaction of elementary particles	436
Vasilevskaya D. S., Grigoriev D. N., Dudko I. G., Ivanov V. L., Kazanin V. F., Kozyrev A. N., Ruban A. A., Ryzhenenkov A. E., Tolmachev S. S., Fedotov G.V., Shemyakin D. N., Shoukavy Dz. V., Epshteyn L. B. Study of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ with the CMD-3 detector at the electron-positron collider VEPP-2000	449
Chulkov R. V., Korozhan O. P., Orlovich V. A. Statistics of pulse energy fluctuations in a solid-state Raman laser.....	459
Barbarchyk K. A., Baganov O. V., Zamkovets A. D., Tikhomirov S. A., Phung Viet Tiep, Pham Hong Minh. Spectral-kinetic properties of transient absorption of hybrid silver–copper phthalocyanine nanostructures.....	470
Tolkacheva E. A., Markevich V. P., Murin L. I. Local vibrational modes of vacancy-oxygen-related complexes at room temperature	480
Yakushevich H. S., Bogaturev Y. V., Vasilenkov N. A., Grabchikov S. S., Lastovski S. B., Maksimov A. Y. Attenuation of Earth’s radiation belt electrons with protective shields based on composite W-Cu.....	488
Batyanovskii A. V., Namiot V. A., Filatov I. V., Tumanyan V. G., Esipova N. G., Volotovskiy I. D. Fourier transform in spherical systems as a tool of structural biology.....	496

SCIENTISTS OF BELARUS

Kazak Nikolay Stanislavovich (To the 75th Anniversary).....	504
List of Publications for 2020 in “Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series”	510

МАТЕМАТИКА
MATHEMATICSУДК 517.925
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-391-397>Поступила в редакцию 20.10.2020
Received 20.10.2020**А. К. Деменчук***Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь***ДОСТАТОЧНОЕ УСЛОВИЕ НЕРАЗРЕШИМОСТИ ЗАДАЧИ УПРАВЛЕНИЯ
АСИНХРОННЫМ СПЕКТРОМ ЛИНЕЙНЫХ ПОЧТИ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИСТЕМ
С ДИАГОНАЛЬНЫМ УСРЕДНЕНИЕМ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ МАТРИЦЫ**

Аннотация. Рассматривается линейная система управления с почти периодической матрицей коэффициентов и управлением в виде обратной связи, линейной по фазовым переменным. Предполагается, что коэффициент обратной связи является почти периодическим и модуль его частот, т. е. наименьшая аддитивная группа вещественных чисел, включающая все показатели Фурье этого коэффициента, содержится в частотном модуле матрицы коэффициентов. Ставится следующая задача: выбрать такое управление из допустимого множества, чтобы у замкнутой управления системы появились почти периодические решения, спектр частот (множество показателей Фурье) которых содержит наперед заданное подмножество, а пересечение модулей частот решения и матрицы коэффициентов тривиально. Поставленная задача названа задачей управления спектром нерегулярных колебаний (асинхронным спектром) с целевым множеством частот. К настоящему времени она изучена только в весьма частном случае, когда среднее значение почти периодической матрицы коэффициентов системы является нулевым. В случае же ненулевого усреднения вопрос остается открытым. В работе получено достаточное условие, при выполнении которого задача управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с диагональным усреднением матрицы коэффициентов не имеет решения.

Ключевые слова: почти периодические линейные системы управления, диагональное среднее значение, показатели Фурье, сильно нерегулярные колебания, асинхронный спектр

Для цитирования. Деменчук А. К. Достаточное условие неразрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с диагональным усреднением матрицы коэффициентов / А. К. Деменчук // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 391–397. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-391-397>

Aleksandr K. Demenchuk*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus***A SUFFICIENT CONDITION FOR THE UNSOLVABILITY OF THE CONTROL PROBLEM OF THE
ASYNCHRONOUS SPECTRUM OF LINEAR ALMOST PERIODIC SYSTEMS WITH THE DIAGONAL
AVERAGING OF THE COEFFICIENT MATRIX**

Abstract. We consider a linear control system with an almost periodic matrix of the coefficients. The control has the form of feedback that is linear on the phase variables. It is assumed that the feedback coefficient is almost periodic and its frequency modulus, i. e. the smallest additive group of real numbers, including all the Fourier exponents of this coefficient, is contained in the frequency modulus of the coefficient matrix. The following problem is formulated: choose a control from an admissible set for which the system closed by this control has almost periodic solutions with the frequency spectrum (a set of Fourier exponents) containing a predetermined subset, and the intersection of the frequency modules of solution and the coefficient matrix is trivial. The problem is called as the control problem of the spectrum of irregular oscillations (asynchronous spectrum) with the target set of frequencies. At present, this problem has been studied only in a very special case, when the average value of the almost periodic coefficients matrix of the system is zero. In the case of nontrivial averaging, the question remains open. In the paper, a sufficient condition is obtained under which the control problem of the asynchronous spectrum of linear almost periodic systems with diagonal averaging of the coefficient matrix has no solution.

Keywords: almost periodic linear control systems, diagonal averaging, Fourier exponents, strongly irregular oscillations, asynchronous spectrum

For citation. Demenchuk A. K. A sufficient condition for the unsolvability of the control problem of the asynchronous spectrum of linear almost periodic systems with the diagonal averaging of the coefficient matrix. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 391–397 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-391-397>

Введение. Изучению различных вопросов теории управления для обыкновенных периодических дифференциальных систем посвящено достаточно большое число работ (см., напр., [1–3] и др.). Для почти периодических систем управления подобные исследования существенно усложняются. В этом направлении можно отметить результаты исследований [4–8], характерной особенностью которых является рассмотрение так называемого регулярного случая, когда априори предполагается совпадение частот самой системы и ее решений.

Вместе с тем, как показали Я. Курцвейль и О. Вейвода [9], система обыкновенных дифференциальных почти периодических уравнений может допускать такие решения, что пересечение частотных модулей решения и системы является тривиальным, т. е. никакая ненулевая частота решения не будет линейной комбинацией с рациональными коэффициентами частот системы. Этот результат позволяет предположить, что при наличии определенных воздействий у системы могут быть почти периодические решения с самым разнообразным спектром частот, в том числе и асинхронным.

В работе [10] впервые была сформулирована задача управления асинхронным спектром для периодических систем. Серия условий ее разрешимости приведена в монографии [11, гл. III]. Частично подобные вопросы для квазипериодических систем изучены в [12]. Задача управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем сформулирована в [13] и дан критерий ее разрешимости для случая, когда среднее значение матрицы коэффициентов является нулевым.

В настоящей статье исследуются вопросы разрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем, у которых усреднение коэффициентной матрицы является ненулевым диагональным.

Предварительные сведения. Приведем необходимые для дальнейшего изложения понятия и факты из теории почти периодических (по Бору) функций [12, гл. 1, 2]. Пусть $f(t)$ – непрерывная на всей числовой оси вещественная функция.

Функция $f(t)$ называется почти периодической (по Бору), если для произвольного положительного ε множество ее ε -почти периодов является относительно плотным, т. е. существует такое положительное число l , зависящее от ε , что любой отрезок длины l вещественной оси содержит по меньшей мере один ε -почти период.

Среднее значение почти периодической функции $f(t)$ определяется равенством

$$\hat{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(t) dt.$$

Модуль (частотный модуль) $\text{Mod}(f)$ почти периодической функции $f(t)$ – это наименьшая аддитивная группа вещественных чисел, содержащая все показатели Фурье (частоты) этой функции.

Пусть $g(t, x)$ – вектор-функция, почти периодическая по t равномерно относительно x из некоторого компактного множества. Как отмечено во введении, Я. Курцвейль и О. Вейвода доказали, что система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = g(t, x)$$

может иметь почти периодическое решение $x(t)$ такое, что пересечение частотных модулей решения и правой части тривиально, т. е.

$$\text{Mod}(x) \cap \text{Mod}(g) = \{0\}.$$

В дальнейшем такие почти периодические решения будем называть сильно нерегулярными.

Матрица $P(t)$ считается почти периодической, если все ее элементы скалярные почти периодические функции. Будем говорить, что некоторые столбцы матрицы $P(t)$ линейно независимы над \mathbb{R} , если их линейные комбинации с вещественными коэффициентами тождественно равны нулю тогда и только тогда, когда все коэффициенты нулевые. Через $\text{rank}_{\text{col}} P$ обозначим столбцовый ранг матрицы $P(t)$, т. е. наибольшее число ее линейно независимых над \mathbb{R} столбцов. Аналогично вводится понятие $\text{rank}_{\text{row}} P$ строчного ранга. Если столбцовый ранг матрицы $P(t)$ меньше числа ее столбцов, то матрицу $P(t)$ будем называть матрицей неполного столбцового ранга. Отметим, что в общем случае, как показывает следующий пример, столбцовый и строчный ранги для нестационарных матриц могут не совпадать. Действительно, возьмем (2×2) -матрицу

$$Q(t) = \begin{pmatrix} \sin t & \sin t \\ \sqrt{2} \cos t & \sqrt{2} \cos t \end{pmatrix}.$$

Для такой матрицы имеем $\text{rank}_{\text{col}} Q = 1$, в то время как $\text{rank}_{\text{row}} Q = 2$. В дальнейшем нам понадобится следующая, вытекающая из [11, п. 2.3]

Лемма. Пусть $P(t)$ – почти периодическая $(k \times m)$ -матрица. Линейная функциональная система

$$P(t)z = 0$$

имеет сильно нерегулярное почти периодическое решение $z = z(t)$ тогда и только тогда, когда $P(t)$ – матрица неполного столбцового ранга, т. е. $\text{rank}_{\text{col}} P < m$.

Постановка задачи. Рассмотрим линейную нестационарную систему управления

$$\dot{x} = A(t)x + Bu, \quad t \in \mathbb{R}, \quad n \geq 2, \tag{1}$$

где $x = x(t) \in \mathbb{R}^n$ – фазовый вектор системы, $u = u(t) \in \mathbb{R}^n$ – вход, B – матрица при управлении – постоянная и имеет размерность n , $A(t)$ – непрерывная почти периодическая $(n \times n)$ -матрица с модулем частот $\text{Mod}(A)$. Предположим, что управление задается в виде обратной связи, линейной по фазовым переменным

$$u = U(t)x \tag{2}$$

с непрерывной почти периодической $(n \times n)$ -матрицей $U(t)$ (коэффициентом обратной связи), модуль частот которой содержится в модуле частот матрицы коэффициентов, т. е. $\text{Mod}(U) \subseteq \text{Mod}(A)$.

Требуется получить условия на правую часть системы (1) такие, чтобы при любом выборе коэффициента обратной связи из указанного допустимого множества замкнутая система

$$\dot{x} = (A(t) + BU(t))x \tag{3}$$

не имела сильно нерегулярного почти периодического решения $x(t)$, спектр частот которого содержит заданное подмножество L (целевое множество). Иначе говоря, для системы (1) необходимо найти условия неразрешимости задачи управления асинхронным спектром.

Предположим, что матрица коэффициентов имеет диагональное среднее значение, т. е.

$$\hat{A} = \text{diag}(\hat{a}_{11}, \dots, \hat{a}_{nn}), \quad \hat{a}_{11}^2 + \dots + \hat{a}_{nn}^2 \neq 0. \tag{4}$$

Отметим, что в отличие от работы [13], в таком случае усреднение матрицы $A(t)$ не является тривиальным.

Основной результат. Предварительно заметим, что если матрица при управлении невырожденная, то решение поставленной задачи не вызывает серьезных затруднений. Справедлива

Теорема 1. В случае $\text{rank} B = n$ задача управления асинхронным спектром не имеет решений, если выполняется условие

$$|L| > [n/2]. \tag{5}$$

Доказательство проведем методом от противного. Пусть задача управления асинхронным спектром системы (1) разрешима. Тогда из [11, п. 2.2] вытекает, что существуют постоянные

ная вещественная квадратная матрица H размерности n и почти периодическая функция $x(t)$, $\text{Mod}(x) \cap \text{Mod}(A) = \{0\}$, удовлетворяющие тождеству

$$\dot{x}(t) - Hx(t) \equiv 0,$$

при этом неосциллирующая составляющая коэффициента обратной связи в силу невырожденности матрицы при управлении определяется равенством

$$\hat{U} = B^{-1}(H - \text{diag}(\hat{a}_{11}, \dots, \hat{a}_{nn})).$$

В итоге получаем противоречие с исходным предположением, заключающееся в том, что почти периодическая функция $x(t)$, имеющая согласно оценке (5) больше чем $[n/2]$ частот, является решением линейной n -мерной стационарной системы. Теорема доказана.

Далее рассмотрим случай, когда матрица при управлении является вырожденной, т. е.

$$\text{rank } B = r \quad (1 \leq r < n), \quad (6)$$

при этом первые ее $n - r = d$ строк нулевые. Обозначим $(r \times n)$ -матрицу, составленную из остальных строк матрицы B , через $B_{r,n}$. Ранг матрицы $B_{r,n}$ также равен r .

С учетом представления (6) матрицы B , матрицу коэффициентов разобьем на четыре блока соответствующих размерностей, указанных нижними индексами:

$$A(t) = \begin{pmatrix} A_{d,d}^{(11)}(t) & A_{d,r}^{(12)}(t) \\ A_{r,d}^{(21)}(t) & A_{r,r}^{(22)}(t) \end{pmatrix}.$$

Принимая во внимание условие (4), среднее значение матрицы коэффициентов запишем в виде

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{d,d}^{(11)}(t) & 0 \\ 0 & A_{r,r}^{(22)}(t) \end{pmatrix},$$

при этом $\hat{A}_{d,d}^{(11)} = \text{diag}(\hat{a}_{11}, \dots, \hat{a}_{dd})$, $\hat{A}_{r,r}^{(22)} = \text{diag}(\hat{a}_{d+1d+1}, \dots, \hat{a}_{nn})$. Тогда осциллирующая часть матрицы коэффициентов также представляется в следующей блочной форме:

$$\tilde{A}(t) = A(t) - \hat{A} = \begin{pmatrix} A_{d,d}^{(11)}(t) - \hat{A}_{d,d}^{(11)} & A_{d,r}^{(12)}(t) \\ A_{r,d}^{(21)}(t) & A_{r,r}^{(22)}(t) - \hat{A}_{r,r}^{(22)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{d,d}^{(11)}(t) & A_{d,r}^{(12)}(t) \\ A_{r,d}^{(21)}(t) & \tilde{A}_{r,r}^{(22)}(t) \end{pmatrix}.$$

Отметим, что в случае диагонального среднего значения (4) матрицы коэффициентов $A(t)$ левый нижний и правый верхний блоки ее осциллирующей части $\tilde{A}(t)$ являются соответствующими блоками самой матрицы, однако $\tilde{A}(t) \neq A(t)$. Обозначим через q столбцовый ранг прямоугольной $(d \times n)$ -матрицы, составленной из блоков $\tilde{A}_{d,d}^{(11)}(t)$ и $A_{d,r}^{(12)}(t)$, т. е. $\text{rank}_{\text{col}} \begin{pmatrix} \tilde{A}_{d,d}^{(11)} & A_{d,r}^{(12)} \end{pmatrix} = q$.

Имеет место

Теорема 2. Пусть выполняются условия (4), (6) и равенство

$$q = n. \quad (7)$$

Тогда задача управления асинхронным спектром системы (1) не имеет решений.

Доказательство. Допустим, что задача управления асинхронным спектром системы (1) разрешима, т. е. найдется почти периодический коэффициент обратной связи $U(t)$, $\text{Mod}(U) \subseteq \text{Mod}(A)$ такой, что замкнутая управлением (2) система (3) имеет сильно нерегулярное почти периодическое решение $x(t)$, спектр которого содержит целевое множество ненулевых частот $L = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s, \dots\}$, $s \geq 1$.

Запишем коэффициент обратной связи, его среднее значение и осциллирующую часть соответственно в следующей блочной форме:

$$U(t) = (U_{n,d}(t) \quad U_{n,d}(t)), \quad \hat{U} = (\hat{U}_{n,d} \quad \hat{U}_{n,d}), \quad \tilde{U}(t) = (\tilde{U}_{n,d}(t) \quad \tilde{U}_{n,d}(t)).$$

Тогда в силу условия (6) система (3) примет вид

$$\dot{x} = \begin{pmatrix} A_{d,d}^{(11)}(t) & A_{d,r}^{(12)}(t) \\ A_{r,d}^{(21)}(t) & A_{r,r}^{(22)}(t) \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} 0 \\ B_{r,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{n,d}(t) & U_{n,d}(t) \end{pmatrix} x$$

или

$$\dot{x} = \begin{pmatrix} A_{d,d}^{(11)}(t) & A_{d,r}^{(12)}(t) \\ A_{r,d}^{(21)}(t) + B_{r,n}U_{n,d}(t) & A_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}U_{n,d}(t) \end{pmatrix} x.$$

Для вектора x выполним разбиение

$$x = \text{col} \left(x^{[d]}, x_{[r]} \right), \quad x^{[d]} = \text{col} (x_1, \dots, x_d), \quad x_{[r]} = \text{col} (x_{d+1}, \dots, x_n),$$

что позволит записать последнюю систему более подробно:

$$\begin{aligned} \dot{x}^{[d]} &= A_{d,d}^{(11)}(t)x^{[d]} + A_{d,r}^{(12)}(t)x_{[r]}, \\ \dot{x}_{[r]} &= \left(A_{r,d}^{(21)}(t) + B_{r,n}U_{n,d}(t) \right) x^{[d]} + \left(A_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}U_{n,d}(t) \right) x_{[r]}. \end{aligned}$$

Согласно сделанному предположению, эта система имеет сильно нерегулярное почти периодическое решение

$$x(t) = \text{col} \left(x^{[d]}(t), x_{[r]}(t) \right).$$

Вследствие [11, теорема 2.2] векторы $x^{[d]}(t), x_{[r]}(t)$ удовлетворяют также системе, состоящей из четырех подсистем:

$$\begin{aligned} \dot{x}^{[d]} &= \hat{A}_{d,d}^{(11)}(t)x^{[d]} + \hat{A}_{d,r}^{(12)}(t)x_{[r]}, \\ \dot{x}_{[r]} &= \left(\hat{A}_{r,d}^{(21)}(t) + B_{r,n}\hat{U}_{n,d}(t) \right) x^{[d]} + \left(\hat{A}_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}\hat{U}_{n,d}(t) \right) x_{[r]}, \\ \tilde{A}_{d,d}^{(11)}(t)x^{[d]} + \tilde{A}_{d,r}^{(12)}(t)x_{[r]} &= 0, \\ \left(\tilde{A}_{r,d}^{(21)}(t) + B_{r,n}\tilde{U}_{n,d}(t) \right) x^{[d]} + \left(\tilde{A}_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}\tilde{U}_{n,d}(t) \right) x_{[r]} &= 0. \end{aligned}$$

В силу условия (4), наложенного на среднее значение матрицы коэффициентов, полученная система примет вид

$$\begin{aligned} \dot{x}^{[d]} &= \hat{A}_{d,d}^{(11)}(t)x^{[d]}, \\ \dot{x}_{[r]} &= B_{r,n}\hat{U}_{n,d}(t)x^{[d]} + \left(\hat{A}_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}\hat{U}_{n,d}(t) \right) x_{[r]}, \\ \tilde{A}_{d,d}^{(11)}(t)x^{[d]} + A_{d,r}^{(12)}(t)x_{[r]} &= 0, \\ \left(A_{r,d}^{(21)}(t) + B_{r,n}\tilde{U}_{n,d}(t) \right) x^{[d]} + \left(\tilde{A}_{r,r}^{(22)}(t) + B_{r,n}\tilde{U}_{n,d}(t) \right) x_{[r]} &= 0. \end{aligned} \tag{8}$$

Из третьей подсистемы системы (8) следует, что имеет место тождество

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_{d,d}^{(11)}(t) & A_{d,r}^{(12)}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{[d]}(t) \\ x_{[r]}(t) \end{pmatrix} \equiv 0. \tag{9}$$

Так как имеет место включение модулей

$$\text{Mod} \left(\tilde{A}_{d,d}^{(11)} \right) \subseteq \text{Mod} (A), \quad \text{Mod} \left(A_{d,r}^{(12)} \right) \subseteq \text{Mod} (A),$$

то частотный модуль матрицы коэффициентов тождества (9) также содержится в модуле частот матрицы коэффициентов системы (1), т. е.

$$\text{Mod}\left(\tilde{A}_{d,d}^{(11)} A_{d,r}^{(12)}\right) \subseteq \text{Mod}(A).$$

Тогда, поскольку выполняется условие $\text{Mod}(x) \cap \text{Mod}(A) = \{0\}$, то частотные модули матрицы коэффициентов тождества (9) и почти периодического вектора $\text{col}\left(x^{[d]}(t), x_{[r]}(t)\right)$ также допускают только тривиальное пересечение, т. е.

$$\text{Mod}\left(\tilde{A}_{d,d}^{(11)} A_{d,r}^{(12)}\right) \cap \text{Mod}(x) = \{0\}.$$

Это значит, что почти периодический вектор $\text{col}\left(x^{[d]}(t), x_{[r]}(t)\right)$ является сильно нерегулярным решением третьей подсистемы из (8). Поэтому, согласно лемме, матрица коэффициентов этой подсистемы должна иметь неполный столбцовый ранг, что вступает в противоречие с условием (7) теоремы.

Следовательно, исходное допущение неверно и задача управления асинхронным спектром системы (1) не имеет решений. Теорема доказана.

С л е д с т в и е. При выполнении условия (4) для $n = 2$ и $r = 1$ задача управления асинхронным спектром системы (1) неразрешима.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Действительно, в таком случае усреднение матрицы коэффициентов замкнутой управлением (2) системы (3) будет вещественным нижнетреугольным, вследствие чего эта система согласно [14, с. 37] не может иметь сильно нерегулярных почти периодических решений, отличных от стационарных.

Выводы. Необходимым условием разрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с диагональным средним значением матрицы коэффициентов является неполнота столбцового ранга прямоугольной матрицы, построенной из блоков осцилирующей части матрицы коэффициентов.

Благодарности. Работа выполнена в Институте математики НАН Беларуси при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проект № Ф20Р-005 «Задачи управления по первому приближению для нестационарных систем в условиях неопределенности».

Acknowledgements. The work was carried out at the Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus within the framework of grant no. Ф20Р-005 “Control problems on the first approximation for non-stationary systems under uncertainty” of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research.

Список использованных источников

1. Красовский, Н. Н. Теория управления движением / Н. Н. Красовский. – М.: Наука, 1968. – 476 с.
2. Зубов, В. И. Лекции по теории управления / В. И. Зубов. – М.: Наука, 1975. – 495 с.
3. Тонков, Е. Л. Линейная задача оптимального управления периодическими решениями / Е. Л. Тонков // Дифференц. уравнения. – 1976. – Т. 12, № 6. – С. 1007–1011.
4. Иванов, А. Г. Оптимальное управление почти периодическими движениями / А. Г. Иванов // Приклад. математика и механика. – 1992. – Т. 56, вып. 5. – С. 837–846.
5. Гайшун, И. В. Введение в теорию нестационарных линейных систем / И. В. Гайшун. – Минск: Ин-т математики НАН Беларуси, 1999. – 408 с.
6. Иванов, А. Г. Элементы математического аппарата задач почти периодической оптимизации. I / А. Г. Иванов // Изв. Ин-та математики и информатики Удм. гос. ун-та. – 2002. – Вып. 1. – С. 3–100.
7. Попова, С. Н. Управление асимптотическими инвариантами систем с почти периодическими коэффициентами / С. Н. Попова // Вестн. Удм. ун-та. Математика. Механика. Компьютер. науки. – 2008. – Вып. 2. – С. 1–2.
8. Макаров, Е. К. Управляемость асимптотических инвариантов нестационарных линейных систем / Е. К. Макаров, С. Н. Попова. – Минск: Беларус. навука, 2012. – 407 с.
9. Курцвейль, Я. О периодических и почти периодических решениях систем обыкновенных дифференциальных уравнений / Я. Курцвейль, О. Вейвода // Чехосл. мат. журн. – 1955. – Т. 5, № 3. – С. 362–370.
10. Папалекси, Н. Д. Об одном случае параметрически связанных систем / Н. Д. Папалекси // Изв. Акад. наук СССР. Сер. физ. – 1939. – Т. 1. – С. 373–379.
11. Деменчук, А. К. Задача управления спектром сильно нерегулярных периодических колебаний / А. К. Деменчук // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2009. – Т. 53, № 4. – С. 37–42.

12. Деменчук, А. К. Управление асинхронным спектром линейных квазипериодических систем с тривиальным усреднением матрицы коэффициентов / А. К. Деменчук // Дифференц. уравнения. – 2017. – Т. 53, № 2. – С. 281–283.
13. Левитан, Б. М. Почти периодические функции / Б. М. Левитан. – М.: Гостехиздат, 1953. – 396 с.
14. Деменчук, А. Асинхронные колебания в дифференциальных системах. Условия существования и управление / А. Деменчук. – Saarbrücken: Lambert Academic Publishing, 2012. – 186 с.
15. Деменчук, А. К. Необходимое условие разрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с нулевым средним матрицы коэффициентов / А. К. Деменчук // Вест. Нац. Акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2019. – Т. 55, № 2. – С. 176–181. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-176-181>

References

1. Krasovskii N. N. *The Theory of Control of Motion*. Moscow, Nauka Publ., 1968. 476 p. (in Russian).
2. Zubov V. I. *Lectures on control theory*. Moscow, Nauka Publ., 1975. 495 p. (in Russian).
3. Tonkov E. L. The linear problem on the optimal control of periodic solutions. *Differentsial'nye uravneniya = Differential Equations*, 1976, vol. 12, no. 6, pp. 1007–1011 (in Russian).
4. Ivanov A. G. Optimal control of almost periodic motions. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1992, vol. 56, no. 5, pp. 737–746. [https://doi.org/10.1016/0021-8928\(92\)90059-h](https://doi.org/10.1016/0021-8928(92)90059-h)
5. Gaishun I. V. *Introduction to the theory of nonstationary linear systems*. Minsk, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, 1999. 408 p. (in Russian).
6. Ivanov A. G. Elements of the mathematical apparatus of problems of almost periodic optimization. I. *Izvestiya Instituta Matematiki i Informatiki Udmurtskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Institute of Mathematics and Informatics at Udmurt State University*, 2002, iss. 1, pp. 3–100 (in Russian).
7. Popova S. N. Control of asymptotic invariants of systems with almost periodic coefficients. *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki = The Bulletin of Udmurt University. Mathematics. Mechanics. Computer Science*, 2008, iss. 2, pp. 1–2 (in Russian).
8. Makarov E. K., Popova S. N. *Controllability of asymptotic invariants of nonstationary linear systems*. Minsk, Belaruskaya navuka Publ., 2012. 407 p. (in Russian).
9. Kurzweil J., Veivoda O. On periodic and almost periodic solutions of the ordinary differential systems. *Czechoslovak Mathematical Journal*, 1955, vol. 5, no. 3, pp. 362–370 (in Russian).
10. Papaleksi N. D. On one case of parametrically coupled systems. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Physical series*, 1939, vol. 1, pp. 373–379 (in Russian).
11. Demenchuk A. K. The control problem of the spectrum of strongly irregular periodic oscillations. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2009, vol. 53, no. 4, pp. 37–42 (in Russian).
12. Demenchuk A. K. Control of the asynchronous spectrum of linear quasiperiodic systems with trivial averaging of the coefficient matrix. *Differentsial'nye uravneniya = Differential Equations*, 2017, vol. 53, no. 2, pp. 281–283 (in Russian).
13. Levitan B. M. *Almost Periodic Functions*. Moscow, Gostekhizdat Publ., 1953. 396 p. (in Russian).
14. Demenchuk A. *Asynchronous Oscillations in Differential Systems. Conditions of Existence and Control*. Saarbrücken, Lambert Academic Publishing, 2012. 186 p. (in Russian).
15. Demenchuk A. K. Necessary condition for solvability of the control problem of an asynchronous spectrum of linear almost periodic systems with trivial averaging of the coefficient matrix. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 2, pp. 176–181 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-176-181>

Информация об авторе

Деменчук Александр Константинович – доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник отдела дифференциальных уравнений, Институт математики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: demenchuk@im.bas-net.by

Information about the author

Aleksandr K. Demenchuk – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Chief Researcher of the Department of Differential Equations, Institute of Mathematics of the National Academy of Science of Belarus (11, Surganova Str., Minsk, 220072, Republic of Belarus). E-mail: demenchuk@im.bas-net.by

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 519.177

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-398-407>

Поступила в редакцию 29.10.2020

Received 29.10.2020

В. И. Бенедиктович*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь***ГЛАВНЫЕ СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ГРАФА И ЕГО ГАМИЛЬТОНОВОСТЬ**

Аннотация. Понятие (κ, τ) -регулярного множества вершин впервые появилось в 2004 г. Оказалось, что существование многих классических комбинаторных структур в графе, таких как совершенные паросочетания, гамильтоновы циклы, эффективные доминирующие множества и др., может быть охарактеризовано с помощью (κ, τ) -регулярных множеств, определение которых эквивалентно нахождению этих классических комбинаторных структур. В свою очередь определение (κ, τ) -регулярных множеств тесно связано со свойствами главного спектра графа. В статье обобщаются известные свойства (κ, κ) -регулярных множеств графа на произвольные (κ, τ) -регулярные множества графов с акцентом на связь их с классическими комбинаторными структурами. Также приводится алгоритм распознавания гамильтоновости графа, который становится полиномиальным в некоторых классах графов, например в классе графов с фиксированным цикломатическим числом.

Ключевые слова: совершенное паросочетание, гамильтонов цикл, эффективное доминирующее множество, матрица смежности, (κ, τ) -регулярное множество, главный спектр графа

Для цитирования. Бенедиктович, В. И. Главные собственные значения графа и его гамильтоновость / В. И. Бенедиктович // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 398–407. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-398-407>

Vladimir I. Benediktovich*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus***MAIN EIGENVALUES OF A GRAPH AND ITS HAMILTONICITY**

Abstract. The concept of (κ, τ) -regular vertex set appeared in 2004. It was proved that the existence of many classical combinatorial structures in a graph like perfect matchings, Hamiltonian cycles, effective dominating sets, etc., can be characterized by (κ, τ) -regular sets the definition whereof is equivalent to the determination of these classical combinatorial structures. On the other hand, the determination of (κ, τ) -regular sets is closely related to the properties of the main spectrum of a graph. This paper generalizes the well-known properties of (κ, κ) -regular sets of a graph to arbitrary (κ, τ) -regular sets of graphs with an emphasis on their connection with classical combinatorial structures. We also present a recognition algorithm for the Hamiltonicity of the graph that becomes polynomial in some classes of graphs, for example, in the class of graphs with a fixed cyclomatic number.

Keywords: perfect matching, Hamiltonian cycle, effective dominating set, adjacency matrix, (κ, τ) -regular set, main spectrum of a graph

For citation. Benediktovich V. I. Main eigenvalues of a graph and its Hamiltonicity. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 398–407 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-398-407>

Пусть G – простой неориентированный связный граф порядка n и размера m с множеством вершин $V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$ и множеством ребер $E(G)$. Матрицей смежности графа $A(G) = (a_{ij})$ графа G называется квадратная матрица порядка n , такая, что:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } v_i v_j \in E(G), \\ 0, & \text{если } v_i v_j \notin E(G). \end{cases}$$

Известно, что компонента $a_{ij}^{(k)}$ матрицы A^k – это число маршрутов длины k из вершины v_i в вершину v_j . Если обозначить через j ($n \times 1$)-вектор-столбец, все компоненты которого равны 1, то i -я компонента вектора $A^k j$ – это число маршрутов длины k из вершины v_i . Обозначим через $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ собственные значения матрицы смежности $A(G)$, взятые вместе со своими кратно-

стями. Множество этих собственных значений будем называть *спектром* графа G и обозначать через $Sp(G)$. Для каждого собственного значения $\lambda \in Sp(G)$ обозначим соответствующее ему *собственное пространство* через $\mathcal{E}_G(\lambda) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (\lambda E - A)x = 0\}$. Граф G называется *вырожденным с дефектом* η , если $\dim \mathcal{E}_G(0) = \dim \ker(A(G)) = \eta$. Различные собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, каждое из которых имеет соответствующий собственный вектор, не ортогональный вектору j , называются, как и соответствующие им собственные векторы, *главными*. При этом множество $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p\}$ образует *главный спектр* графа G . Остальные различные собственные значения $\lambda_{p+1}, \lambda_{p+2}, \dots, \lambda_s$, $s \leq n$, называются *неглавными*. Заметим, что по теореме Фробениуса – Перрона [1] любой граф G содержит главное собственное значение, равное его *индексу*.

Многочлен

$$M(G, x) =: \prod_{i=1}^p (x - \lambda_i) = x^p - c_0 x^{p-1} - c_1 x^{p-2} - \dots - c_{p-2} x - c_{p-1}, \tag{1}$$

корнями которого являются все главные собственные значения графа G , называется *главным характеристическим многочленом* графа G . Нетрудно показать, что все его коэффициенты являются целыми числами [2].

Арифметическое пространство \mathbb{R}^n можно разложить в прямую сумму: $\mathbb{R}^n = Main(G) \oplus (Main(G))^\perp$, где векторное пространство $Main(G)$ натянуто на ортонормированную систему из p главных собственных векторов, относящихся к соответствующим главным собственным значениям $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, а векторное пространство $(Main(G))^\perp$ натянуто на ортонормированную систему из остальных $(n - p)$ собственных векторов, ортогональных j . При этом оба векторных пространства $Main(G)$ и $(Main(G))^\perp$ являются A -инвариантными [3].

Матрица $W = (j \ Aj \ A^2 j \ \dots \ A^{p-1} j)$ размера $(n \times p)$ называется *матрицей маршрутов* графа G . Можно показать, что векторное пространство $ColSpW =: \langle j, Aj, A^2 j, \dots, A^{p-1} j \rangle$, натянутое на столбцы матрицы маршрутов, совпадает с пространством $Main(G)$ [3]. Кроме того, добавление новых столбцов вида $A^i j$, $i \in \mathbb{N}$, к матрице маршрутов не увеличивает ее ранг в силу известного равенства [3]:

$$A^p j = W \begin{pmatrix} c_{p-1} \\ \vdots \\ c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Важную роль в нахождении главного спектра графа G играет следующая матрица:

$$C =: \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & c_{p-1} \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & c_{p-2} \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & c_{p-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & c_1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & c_0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

поскольку она обладает следующими свойствами [3]:

- 1) определяет матрицу маршрутов, т. е. матрица W является матрицей маршрутов тогда и только тогда, когда выполняется равенство $AW = WC$;
- 2) спектр $Sp(C)$ матрицы C совпадает с главным спектром графа G .

Кроме матрицы смежности будем также рассматривать *беззнаковую матрицу Лапласа* (беззнаковый лапласиан) графа G : $Q(G) =: D(G) + A(G)$, где $D(G)$ – диагональная матрица, состоящая из диагональных элементов, равных степеням d_v вершин графа G . Матрица $Q(G)$ является симметрической и положительно полуопределенной.

Подразбиением графа G порядка n и размера m называется граф G^* порядка $(n + m)$ и размера $2m$, который получается из графа G заменой каждого ребра $e = v_i v_j$ простой цепью длины 2, т. е. добавлением новой вершины w_e и заменой ребра $e = v_i v_j$ двумя новыми ребрами $v_i w_e$ и $v_j w_e$. Реберный граф $L(G)$ графа G – это граф, вершинами которого являются ребра графа G , при этом они смежны, если существует в точности одна вершина, инцидентная соответствующим ребрам графа G . Цикломатическое число связного графа – это число ребер, которое нужно удалить из графа, чтобы получить дерево, т. е. число, равное $\gamma(G) = m - n + 1$. Для каждой вершины $v \in V(G)$ ее окружением называется множество $N(v) = \{u \in V(G) \mid uv \in E(G)\}$ ее соседей. Через $G[K]$ будем обозначать граф, порожденный подмножеством вершин $K \subset V(G)$. Подмножество вершин $S \subset V(G)$ называется (κ, τ) -регулярным, если граф $G[S]$ является κ -регулярным графом, а для любой вершины $v \in V(G) \setminus S$ число ее соседей в S равно τ , т. е. $|N_G(v) \cap S| = \tau$. Вектор x_S , у которого i -я компонента равна 1, если $v_i \in S$, и равна 0, если $v_i \notin S$, называется характеристическим вектором множества S . Справедливо

Утверждение 1 [3]. Если x_S – характеристический вектор (κ, τ) -регулярного множества S графа G с матрицей смежности $A = A(G)$, то справедливо равенство:

$$(A - (\kappa - \tau)E)x_S = \tau j. \quad (4)$$

Верно и обратное утверждение: всякое $(0,1)$ -решение системы (4) определяет некоторое (κ, τ) -регулярное множество S графа G [4].

Лемма 1. Пусть G – произвольный граф порядка n и размера m , G^* – его подразбиение, $Q(G)$ – беззнаковый лапласиан графа G . Тогда справедливо равенство

$$\chi_{A(G^*)}(\lambda) = \lambda^{m-n} \cdot \chi_{Q(G)}(\lambda^2).$$

Доказательство. Пусть $B_{n \times m} = (b_{ij})_{n \times m}$ – матрица инцидентности графа G :

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если вершина } v_i \text{ инцидентна ребру } e_j, \\ 0, & \text{если вершина } v_i \text{ не инцидентна ребру } e_j. \end{cases}$$

Тогда беззнаковый лапласиан графа G равен $Q(G) = BB^T$, а матрица смежности подразбиения G^* графа G равна $A(G^*) = \begin{pmatrix} O_{m \times m} & B_{m \times n}^T \\ B_{n \times m} & O_{n \times n} \end{pmatrix}$. Поэтому, используя известное равенство Шура, имеем

$$\chi_{A(G^*)}(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda E_m & -B^T \\ -B & \lambda E_n \end{vmatrix} = \lambda^{m-n} \begin{vmatrix} \lambda^2 - BB^T & \\ & \lambda E_n \end{vmatrix} = \lambda^{m-n} \cdot \chi_{Q(G)}(\lambda^2).$$

Лемма 1 доказана.

Лемма 2. Если 0 – главное собственное значение беззнакового лапласиана $Q(G)$ графа G , то 0 является главным собственным значением матрицы смежности $A(G^*)$.

Доказательство. По предыдущей лемме 0 является собственным значением матрицы смежности $A(G^*)$. Пусть существует ненулевой вектор $x \in \mathbb{R}^n$ такой, что $Q(G)x = BB^T x = 0$ и $(x, j_n) \neq 0$. Тогда, очевидно, $B^T x = 0$. Положим $y = \begin{pmatrix} 0_m \\ x \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m+n}$. Поэтому имеем

$$A(G^*)y = \begin{pmatrix} O_m & B_{m \times n}^T \\ B_{n \times m} & O_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0_m \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^T x \\ 0_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0_m \\ 0_n \end{pmatrix},$$

причем $(y, j_{m+n}) = (x, j_n) \neq 0$, т. е. 0 – главное собственное значение матрицы смежности $A(G^*)$. Лемма 2 доказана.

Известно утверждение из [3].

Лемма 3 [3]. Если 0 – главное собственное значение подразбиения G^* графа G , то граф G не гамильтонов.

Из лемм 1–3 непосредственно вытекает справедливость следующего утверждения.

Теорема 1. Если 0 – главное собственное значение беззнакового лапласиана $Q(G)$ графа G , то граф G не гамильтонов.

Пусть $L(G)$ обозначает реберный граф графа G . Далее нам понадобится еще одно утверждение.

Утверждение 2 [4]. Граф G гамильтонов тогда и только тогда, когда его реберный граф содержит (2,4)-регулярное множество S , индуцирующее связный подграф.

Теорема 2. Если (-2) – главное собственное значение реберного графа $L(G)$ графа G , то граф G не гамильтонов.

Доказательство. Предположим, что граф G гамильтонов. Тогда по предыдущему утверждению его реберный граф $L(G)$ содержит (2,4)-регулярное множество S , для характеристического вектора которого x_S в силу утверждения 1 справедливо равенство

$$A(L(G))x_S = 4j - 2x_S,$$

что, в силу известного равенства $A(L(G)) = (B^T B) - 2E$, равносильно

$$(B^T B)x_S = (A(L(G)) + 2E)x_S = 4j.$$

Поэтому если собственный вектор v относится к собственному значению (-2) матрицы смежности $A(L(G))$, то v является собственным вектором, относящимся к собственному значению 0 матрицы $B^T B$. А значит, имеем цепочку равенств

$$0 = \left((B^T B)v \right)^T x_S = v^T (B^T B)x_S = 4v^T j = 4(v, j),$$

откуда получаем, что $(v, j) = 0$. Значит, v – неглавный собственный вектор, а (-2) – неглавное собственное значение, противоречие. Теорема 2 доказана.

Далее докажем обобщение теорем 1 и 2. Для этого мы установим справедливость некоторых утверждений для (κ, τ) -регулярных множеств, обобщающих соответствующие утверждения из [3], справедливых для (κ, κ) -регулярных множеств.

Теорема 3. Пусть граф G с матрицей смежности A имеет (κ, τ) -регулярное множество S , тогда для его характеристического вектора x_S имеет место разложение

$$x_S = g + q, \tag{5}$$

где $g = \sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^i j$ и $q \in (Main(G))^\perp$, причем

$$Aq = (\kappa - \tau)q;$$

$$\alpha_{p-1} \kappa - \alpha_0 (\kappa - \tau) = \tau, \quad \alpha_i - \alpha_{i+1} (\kappa - \tau) + \alpha_{p-1} \kappa - \alpha_{p-2-i} = 0, \quad i = \overline{0, p-2}. \tag{6}$$

Доказательство. Действительно, поскольку $\mathbb{R}^n = ColSp(W) \oplus (ColSp(W))^\perp$ и $ColSp(W) = Main(G)$, то разложение (5), где $q \in (Main(G))^\perp$, очевидно. Откуда получаем

$$Ax_S = A \left(\sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^i j \right) + Aq, \tag{7}$$

причем в силу A -инвариантности подпространств $Main(G)$ и $(Main(G))^\perp$ первое слагаемое (7) лежит в пространстве $Main(G)$, а второе – в $(Main(G))^\perp$. С другой стороны, в силу равенства (4) имеем

$$Ax_S = (\kappa - \tau)x_S + \tau j = (\kappa - \tau) \left(\sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^i j + q \right) + \tau j = (\alpha_0 (\kappa - \tau) + \tau) j + (\kappa - \tau) \left(\sum_{i=1}^{p-1} \alpha_i A^i j \right) + (\kappa - \tau)q, \tag{8}$$

где сумма первых двух слагаемых лежит в пространстве $Main(G)$, а третье – в $(Main(G))^\perp$. Поэтому, в силу единственности разложения вектора в прямую сумму двух векторов, из (7) и (8), в частности, получаем $Aq = (\kappa - \tau)q$.

Обозначим $F = A - (\kappa - \tau)E$. Тогда последнее равенство можно записать в виде $Fq = 0$. Следовательно, имеем цепочку равенств

$$F(x_S - q) = Fx_S - Fq = Fx_S = Ax_S - (\kappa - \tau)x_S = \tau j.$$

С другой стороны, в силу равенства (2) $A^p j = c_{p-1}j + \dots + c_0 A^{p-1}j$, поэтому имеем

$$\begin{aligned} F(x_S - q) &= F\left(\sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^i j\right) = \sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^{i+1} j - (\kappa - \tau) \sum_{i=0}^{p-1} \alpha_i A^i j = \\ &= \sum_{i=0}^{p-2} (\alpha_i - (\kappa - \tau)\alpha_{i+1}) A^{i+1} j - (\kappa - \tau)\alpha_0 j + \alpha_{p-1} A^p j = \\ &= (\alpha_{p-1} c_{p-1} - \alpha_0 (\kappa - \tau))j + \sum_{i=0}^{p-2} (\alpha_i - (\kappa - \tau)\alpha_{i+1} + \alpha_{p-1} c_{p-2-i}) A^{i+1} j, \end{aligned}$$

откуда, в силу линейной независимости векторов $j, Aj, A^2 j, \dots, A^{p-1} j$, получаем равенства (6). Теорема 3 доказана.

Решая систему уравнений (6), нетрудно получить, в частности, равенство

$$-\tau = \alpha_{p-1} M(G, (\kappa - \tau)),$$

которое позволяет сформулировать следующее обобщение теорем 1 и 2.

Теорема 4. Если граф G с матрицей смежности A имеет (κ, τ) -регулярное множество S , где $\tau > 0$, тогда $(\kappa - \tau)$ не может быть его главным собственным значением.

Отметим, что это утверждение может быть доказано другим способом [5]. А именно, пусть λ – произвольное главное собственное значение матрицы смежности A с соответствующим главным собственным вектором u :

$$Au = \lambda u, \quad u^T j \neq 0.$$

Тогда $\lambda u^T = u^T A$, и поскольку (см. (4)) $Ax_S = (\kappa - \tau)x_S + \tau j$, то имеем цепочку равенств

$$\lambda u^T x_S = u^T Ax_S = u^T ((\kappa - \tau)x_S + \tau j) = (\kappa - \tau)u^T x_S + \tau u^T j,$$

откуда

$$(\lambda - (\kappa - \tau))u^T x_S = \tau u^T j \neq 0,$$

поэтому

$$\lambda \neq (\kappa - \tau), \quad u^T x_S \neq 0.$$

Более того, можно получить явный вид главного собственного значения λ , связанный с его главным собственным вектором u . Так, из последнего равенства следует:

$$(\lambda - \kappa)u^T x_S = \tau(u^T j - u^T x_S) = \tau u^T (j - x_S) = \tau u^T x_{\bar{S}},$$

откуда

$$\lambda = \tau \frac{u^T x_{\bar{S}}}{u^T x_S} + \kappa = \tau \frac{u^T j}{u^T x_S} + (\kappa - \tau).$$

Хорошо известны следующие утверждения.

Утверждение 3 [4]. Граф $G \neq K_2$ имеет совершенное паросочетание тогда и только тогда, когда его реберный граф $L(G)$ содержит $(0, 2)$ -регулярное множество S .

Напомним, что подмножество $S \subset V(G)$ называется доминирующим, если любая вершина $v \in V(G) \setminus S$ имеет, по крайней мере, одного соседа из множества S . Доминирующее множество вершин называется эффективным, если любая вершина $v \in V(G) \setminus S$ имеет в точности одного соседа из множества S .

Утверждение 4 [4]. Подмножество вершин $S \subset V(G)$ графа G является эффективным доминирующим множеством тогда и только тогда, когда S является $(0,1)$ -регулярным множеством графа G .

Следствие 1. Если (-2) – главное собственное значение реберного графа $L(G)$ графа $G \neq K_2$, то он не имеет совершенного паросочетания.

Следствие 2. Если (-1) – главное собственное значение графа G , то он не имеет эффективного доминирующего множества вершин.

Кроме решения системы уравнений (6) разложение вектора g из равенства (5) по базису $\{j, Aj, \dots, A^{p-1}j\}$ пространства $Main(G)$ можно найти также в матричном виде.

Как уже было показано при доказательстве теоремы 3, если граф G имеет (κ, τ) -регулярное множество, то справедливы два равенства:

$$i) (A - (\kappa - \tau)E)g = \tau j;$$

$$ii) (A - (\kappa - \tau)E)q = 0.$$

Будем различать два случая: 1) $(\kappa - \tau) \notin Sp(G)$ и 2) $(\kappa - \tau) \in Sp(G)$.

В случае 1) из ii) следует, что $q = 0$, а значит, $x_S = g$. Поэтому в силу невырожденности матрицы $(A - (\kappa - \tau)E)$ из i) следует $g = x_S = \tau(A - (\kappa - \tau)E)^{-1}j$, т. е. x_S является единственным решением системы $(A - (\kappa - \tau)E)x = \tau j$.

В случае 2) рассмотрим линейное преобразование пространства $Main(G)$:

$$\varphi: Main(G) \rightarrow Main(G),$$

$$x \mapsto ((\kappa - \tau)E - A)x,$$

матрица которого в его базисе $\{j, Aj, \dots, A^{p-1}j\}$, как нетрудно видеть, имеет вид

$$M_\varphi = \begin{pmatrix} (\kappa - \tau) & 0 & \dots & 0 & 0 & -c_{p-1} \\ -1 & (\kappa - \tau) & \dots & 0 & 0 & -c_{p-2} \\ 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & -c_{p-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & (\kappa - \tau) & -c_1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & (\kappa - \tau) - c_0 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что $M_\varphi = (\kappa - \tau)E - C$, где C – матрица (3), поэтому матрица M_φ вырождена тогда и только тогда, когда $(\kappa - \tau)$ – собственное значение матрицы C , что равносильно, $(\kappa - \tau)$ – главное собственное значение графа G . Поэтому в силу теоремы 4 и существования (κ, τ) -регулярного множества в графе G матрица M_φ обратима. Заметим также, что минор матрицы M_φ , стоящий в первых $(p - 1)$ столбцах и последних $(p - 1)$ строках $M_{23\dots p}^{12\dots p-1} = (-1)^{p-1} \neq 0$, поэтому $\text{rank}(M_\varphi) \geq p - 1$.

Очевидно, равенство i) в базисе $\{j, Aj, \dots, A^{p-1}j\}$ эквивалентно равенству

$$M_\varphi \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{p-1} \end{pmatrix} = -\tau \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = -\tau e_1,$$

откуда получаем

$$g = W \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{p-1} \end{pmatrix} = -\tau W M_\varphi^{-1} e_1.$$

Заметим, что

$$\det M_\varphi = \det((\kappa - \tau)E - C) = M(G, (\kappa - \tau)),$$

поэтому

$$M_\varphi^{-1} = \frac{1}{M(G, (\kappa - \tau))} M_\varphi^*,$$

где M_φ^* – присоединенная матрица для M_φ . А значит, чтобы вычислить произведение $M_\varphi^{-1}e_1$, достаточно найти только алгебраические дополнения для элементов первой строки матрицы M_φ . Нетрудно убедиться индукцией по p , что

$$M_\varphi^* e_1 = \begin{pmatrix} (\kappa - \tau)^{p-1} - c_0(\kappa - \tau)^{p-2} - \dots - c_{p-2} \\ (\kappa - \tau)^{p-2} - c_0(\kappa - \tau)^{p-3} - \dots - c_{p-3} \\ \vdots \\ (\kappa - \tau) - c_0 \\ 1 \end{pmatrix} =: \bar{\alpha}.$$

Заметим, что вектор $\bar{\alpha}$ можно также получить, непосредственно решая систему уравнений (6). Поэтому окончательно получаем:

$$g = -\frac{\tau}{M(G, (\kappa - \tau))} W\bar{\alpha},$$

где вектор $g_1 =: W\bar{\alpha}$, по аналогии с [3], назовем *дискриминирующим*, а вектор $g = -\frac{\tau}{M(G, (\kappa - \tau))} W\bar{\alpha} - (\kappa - \tau)$ -*параметрическим вектором* графа G [5].

З а м е ч а н и е. В случае, когда $\kappa = \tau$ имеем $M(G, 0) = -c_{p-1}$, и, значит,

$$\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} -c_{p-2} \\ -c_{p-3} \\ \vdots \\ -c_0 \\ 1 \end{pmatrix}, M_\varphi^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{c_{p-2}}{c_{p-1}} & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{c_{p-3}}{c_{p-1}} & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{c_0}{c_{p-1}} & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ \frac{-1}{c_{p-1}} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

следовательно, вектор

$$g = -\frac{\tau}{c_{p-1}} (c_{p-2}j + c_{p-3}Aj + \dots + c_0A^{p-2}j - A^{p-1}j) = -\frac{\tau}{c_{p-1}} g_1,$$

где вектор g_1 – это дискриминирующий вектор, полученный в [3].

Справедливо следующее утверждение.

Т е о р е м а 5. Для дискриминирующего вектора g_1 произвольного графа G с матрицей смежности A справедливо равенство $(A - (\kappa - \tau)E)g_1 = 0$ тогда и только тогда, когда $(\kappa - \tau)$ является его главным собственным значением.

Доказательство. Необходимость утверждения очевидна, поскольку $g_1 \neq 0$.

Для доказательства достаточности предположим, что главный собственный вектор $u \in \text{Main}(G)$, соответствующий собственному значению $(\kappa - \tau)$, в базисе $\{j, Aj, \dots, A^{p-1}j\}$ пространства $\text{Main}(G)$ имеет координатный столбец

$$\bar{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix},$$

т. е. $u = W\bar{\beta}$. Тогда равенство $Au = (\kappa - \tau)u$ в базисе $\{j, Aj, \dots, A^{p-1}j\}$ эквивалентно $M_\varphi \bar{\beta} = 0$, что эквивалентно системе уравнений

$$\begin{cases} (\kappa - \tau)\beta_1 - c_{p-1}\beta_p = 0; \\ -\beta_1 + (\kappa - \tau)\beta_2 - c_{p-2}\beta_p = 0; \\ -\beta_2 + (\kappa - \tau)\beta_3 - c_{p-3}\beta_p = 0; \\ \dots \\ -\beta_{p-1} + ((\kappa - \tau) - c_0)\beta_p = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Нетрудно видеть, что компонента $\beta_p \neq 0$, иначе из (9), двигаясь снизу вверх, получим, что все компоненты $\beta_i = 0$, $i = 1, p$, что противоречит определению собственного вектора u . Поэтому можно считать, $\beta_p = 1$, тогда из системы (9), снова двигаясь снизу вверх, последовательно находим остальные компоненты $\beta_i = 0$, $i = 1, p-1$, которые, оказывается, совпадают с компонентами вектора $\bar{\alpha}$. Таким образом, получаем, что $u = \beta_p g_1$, т. е. $\ker M_\varphi = \langle g_1 \rangle$. Значит, $M_\varphi g_1 = 0$, что эквивалентно $(A - (\kappa - \tau)E)g_1 = 0$. Теорема 5 доказана.

Основываясь на доказанных утверждениях, далее представим **алгоритм распознавания гамильтоновости графа**. Прежде всего, можно считать, что цикломатическое число связного графа G удовлетворяет неравенству $\gamma(G) \geq 1$. Сформулируем еще утверждение, которое будет использоваться при реализации алгоритма.

Утверждение 5 [4]. Пусть G – граф с (κ, τ) -регулярным множеством $S \subset V(G)$ и g – частное решение линейной системы уравнений

$$(A - (\kappa - \tau)E)x = \tau j,$$

кроме того, $(\kappa - \tau)$ является собственным вектором кратности t . Тогда характеристический вектор x_S множества S определяется равенством

$$x_S = g + \sum_{j=1}^t \delta_{i_j} q_j,$$

где $\delta_{i_j} \in \{-g_{i_j}, 1 - g_{i_j}\}$, $j = \overline{1, t}$, а векторы $\langle q_1, q_2, \dots, q_t \rangle = \mathcal{E}_G(\kappa - \tau)$, причем матрица $V = (q_1 \ q_2 \ \dots \ q_t)$, столбцы которой составлены из этих векторов, содержит единичную матрицу порядка t , стоящую в строках с номерами из множества индексов $I = \{i_1, i_2, \dots, i_t\}$.

Алгоритм распознавания гамильтоновости графа.

Вход: матрица инцидентности размера $n \times t$ графа G порядка n и размера t .

Выход: ответ: является ли граф G гамильтоновым или нет; если граф G гамильтонов, выдается гамильтонов цикл в G .

Шаг 1. Найти матрицу смежности $A = A(L(G))$ реберного графа $L(G)$ графа G по формуле

$$A(L(G)) = (B^T B) - 2E,$$

а также определить наименьшее натуральное число $p \geq 2$, при котором векторы $j, Aj, \dots, A^{p-1}j, A^p j$ являются линейно зависимыми.

Шаг 2. Найти коэффициенты $1, c_0, c_1, \dots, c_{p-2}, c_{p-1}$ характеристического многочлена

$$M(L(G), x) = \prod_{i=1}^p (x - \lambda_i) = x^p - c_0 x^{p-1} - c_1 x^{p-2} - \dots - c_{p-2} x - c_{p-1}$$

графа $L(G)$ из решения однородной системы уравнений $W_{p+1}x = 0$, где матрица W_{p+1} размера $n \times (p + 1)$ получается из матрицы маршрутов $W = (j \ Aj \ A^2j \ \dots \ A^{p-1}j)$ добавлением еще одного столбца $A^p j$.

Шаг 3. Вычислить дискриминирующий вектор $g_1 =: W\bar{\alpha}$, где

$$\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} (-2)^{p-1} - c_0(-2)^{p-2} - \dots - c_{p-2} \\ (-2)^{p-2} - c_0(-2)^{p-3} - \dots - c_{p-3} \\ \vdots \\ (-2) - c_0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Шаг 4. Если $(A + 2E)g_1 = 0$, то по теореме 5 число (-2) является главным собственным значением реберного графа $L(G)$, а значит, согласно теореме 2 граф G негамильтонов.

Если $(A + 2E)g_1 \neq 0$, то возможны 2 случая: 1) (-2) не является собственным значением реберного графа $L(G)$; 2) (-2) является собственным значением реберного графа $L(G)$ кратности t .

В случае 1) проверить, является ли вектор $g = \frac{2}{M(L(G), (-2))} g_1$ $(0,1)$ -вектором с n ненулевыми компонентами: если является, то граф G гамильтонов и $(0,1)$ -вектор g – характеристический вектор гамильтонова цикла, иначе – негамильтонов.

В случае 2) перейти к следующему шагу.

Шаг 5. Решить методом Гаусса систему уравнений $(A + 2E)x = 0$ и найти фундаментальную систему решений q_1, q_2, \dots, q_t , соответствующих наборам e_1, e_2, \dots, e_t , которые принимают свободные неизвестные $x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_t}$ с индексами из некоторого множества $I = \{i_1, i_2, \dots, i_t\}$, где $t = \dim \ker(A + 2E)$ – дефект матрицы $(A + 2E)$. Положить множество $\Lambda =: \{(\delta_{i_1}, \delta_{i_2}, \dots, \delta_{i_t}) \mid \delta_{i_j} \in \{-g_{i_j}, 1 - g_{i_j}\}, i_j \in I\}$ и для каждого набора $(\delta_{i_1}, \delta_{i_2}, \dots, \delta_{i_t})$ из множества Λ проверить, является ли вектор $g + \sum_{j=1}^t \delta_{i_j} q_j$ $(0,1)$ -вектором с n ненулевыми компонентами: если существует такой набор $(\delta_{i_1}, \delta_{i_2}, \dots, \delta_{i_t})$, то граф G гамильтонов и $(0,1)$ -вектор g – характеристический вектор гамильтонова цикла, иначе – негамильтонов.

Конец алгоритма.

Оценим вычислительную сложность предложенного алгоритма. Шаг 1 включает умножение матриц и поэтому требует $O(m^4)$ времени. На шаге 2 можно применить метод исключения Гаусса и поэтому он требует $O(m^3)$ времени. На шаге 3 выполняется алгоритм умножения матриц, на которое затрачивается $O(m^2)$ времени. Такое же время будет затрачено на выполнение шага 4. Шаг 5 требует в общем случае экспоненциальное время $O(2^t m^3)$. Однако в классах графов с ограниченной кратностью собственного значения (-2) его реберного графа на этом шаге будет затрачено полиномиальное время. Хорошо известно [6], что кратность $m(-2, L(G))$ собственного значения (-2) его реберного графа G равна

$$m(-2, L(G)) = \begin{cases} \gamma(G), & \text{если граф } G \text{ двудольный;} \\ \gamma(G) - 1, & \text{если граф } G \text{ не двудольный.} \end{cases}$$

Поэтому, например, в классе графов с фиксированным цикломатическим числом $\gamma(G)$ шаг 5 будет выполняться за полиномиальное время.

Таким образом, хотя проблема распознавания гамильтоновости графа является, как известно, NP-трудной, в некоторых классах графов (например, в классе графов с фиксированным цикломатическим числом) она становится полиномиально разрешимой.

Благодарности. Работа профинансирована Институтом математики НАН Беларуси в рамках Государственной программы фундаментальных исследований «Конвергенция» и Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект № Ф20УКА–005).

Acknowledgements. This work was funded by the Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus within the framework of the State Program for Fundamental Research “Convergence” and the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (project no. Ф20УКА–005).

Список использованных источников

1. Гантмахер, Ф. Р. Теория матриц / Ф. Р. Гантмахер. – Физматлит, 2010. – 560 с.
2. Cvetković, D. A table of connected graphs on six vertices / D. Cvetković, M. Petrić // *Discrete Math.* – 1984. – Vol. 50. – P. 37–49. [https://doi.org/10.1016/0012-365x\(84\)90033-5](https://doi.org/10.1016/0012-365x(84)90033-5)
3. Sciriha, I. Necessary and sufficient conditions for a Hamiltonian graphs / I. Sciriha, D. M. Cardoso // *J. Combin. Math. Combin. Comput.* – 2012. – Vol. 80. – P. 127–150.
4. Cardoso, D. M. An overview of (κ, τ) -regular sets and their applications / D. M. Cardoso // *Discrete Appl. Math.* – 2019. – Vol. 269. – P. 2–10. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2018.12.020>
5. Cardoso, D. M. Main eigenvalues and (κ, τ) -regular sets / D. M. Cardoso, I. Sciriha, C. Zerafa // *Linear Algebra Appl.* – 2010. – Vol. 432, № 9. – P. 2399–2408. <https://doi.org/10.1016/j.laa.2009.07.039>
6. Cvetković, D. Spectral Generalizations of Line Graphs / D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić. – Cambridge University Press, 2004. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511751752>

References

1. Gantmacher F. R. *The Theory of Matrices*. Fizmatlit Publ., 2010. 560 p. (in Russian).
2. Cvetković D., Petrić M. A table of connected graphs on six vertices. *Discrete Mathematics*, 1984, vol. 50, pp. 37–49. [https://doi.org/10.1016/0012-365x\(84\)90033-5](https://doi.org/10.1016/0012-365x(84)90033-5)
3. Sciriha I., Cardoso D. M. Necessary and sufficient conditions for a Hamiltonian graphs. *Journal of Combinatorial Mathematics and Combinatorial Computing*, 2012, vol. 80, pp. 127–150.
4. Cardoso D. M. An overview of (κ, τ) -regular sets and their applications. *Discrete Applied Mathematics*, 2019, vol. 269, pp. 2–10. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2018.12.020>
5. Cardoso D. M., Sciriha I., Zerafa C. Main eigenvalues and (κ, τ) -regular sets. *Linear Algebra and its Applications*, vol. 432, no. 9, pp. 2399–2408. <https://doi.org/10.1016/j.laa.2009.07.039>
6. Cvetković D., Rowlinson P., Simić S. *Spectral Generalizations of Line Graphs*. Cambridge University Press, 2004. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511751752>

Информация об авторе

Бенедиктович Владимир Иванович – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт математики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vbened@im.bas-net.by

Information about the author

Vladimir I. Benediktovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus (Surganov Str., 11, 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vbened@im.bas-net.by

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)
УДК 513+681.3
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-408-410>

Поступила в редакцию 19.02.2019
Received 19.02.2019

В. Г. Найденко

Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

ТОПОЛОГИЯ ЧАСТИЧНОЙ ВЫПУКЛОСТИ

Аннотация. Подтверждена гипотеза Финка – Вуда о том, что если множество направляющих гиперплоскостей частичной выпуклости O' является замыканием некоторого множества O , то множество X является замкнутым направленным полупространством частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O' тогда и только тогда, когда X – замкнутое направленное полупространство частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O .

Ключевые слова: выпуклость, обобщенная выпуклость, частичная выпуклость, топология, гипотеза Финка – Вуда

Для цитирования. Найденко, В. Г. Топология частичной выпуклости / В. Г. Найденко // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 408–410. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-408-410>

Vladimir G. Naidenko

Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

TOPOLOGY OF DIRECTIONAL CONVEXITY

Abstract. Herein, we have proven a Fink – Wood conjecture that if O' is the closure of some orientation set O , then a set is a directed O -halfspace if and only if it is a directed O' -halfspace.

Keywords: convexity, generalized convexity, restricted-orientation convexity, problem to recognize convexity, computational complexity

For citation. Naidenko V. G. Topology of directional convexity. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 408–410 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-408-410>

Введение. Важным аспектом в исследовании частично выпуклых множеств [1] является изучение их топологических свойств. Е. Финк и Д. Вуд сформулировали следующую гипотезу (см.: Conjecture 7.3 [2, с 89]): если множество направляющих гиперплоскостей частичной выпуклости O' является замыканием некоторого множества O , то множество X является замкнутым направленным полупространством частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O' тогда и только тогда, когда X – замкнутое направленное полупространство частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O . Здесь мы приведем положительное решение этой проблемы Финка – Вуда. Дадим необходимые определения [3].

Определения. Пусть в n -мерном линейном пространстве R^n задано фиксированное множество единичных векторов (направлений) $O \subseteq S^{n-1}$, где S^{n-1} – единичная сфера. Прямая, параллельная какому-нибудь вектору из O , называется O -прямой. Напомним, что множество $X \subseteq R^n$ называется частично выпуклым (O -выпуклым), если пересечение X с произвольной O -прямой связно или пусто. Кроме того, замкнутое частично выпуклое множество X называется полупространством частичной выпуклости, если пересечение X с произвольной O -прямой оказывается прямой, лучом или пустым множеством. Полупространство X частичной выпуклости называется направленным, если для любых двух параллельных O -прямых I_1 и I_2 выполняются три условия:

- 1) если пересечение $r_1 = I_1 \cap X$ непустое, то r_1 является лучом;
- 2) если пересечение $r_2 = I_2 \cap X$ непустое, то r_2 является лучом;
- 3) лучи r_1 и r_2 имеют одинаковое направление, т. е. r_1 можно получить из r_2 параллельным переносом и наоборот.

Ориентацией O_X направленного полупространства X частичной выпуклости назовем множество векторов $O_X \subseteq O$ такое, что вектор e из O принадлежит O_X тогда и только тогда, когда для любой точки $a \in X$ луч $\{a + \alpha e \mid \alpha \geq 0\}$ целиком содержится в X .

Отметим, что частичная выпуклость является обобщением понятия классической выпуклости, так как все классически выпуклые множества являются O -выпуклыми. Кроме того, если $O = S^{n-1}$, то O -выпуклость совпадает с классической выпуклостью.

В работе [2] предложен другой способ задания системы O -прямых. Пусть в R^n задано фиксированное множество гиперплоскостей O , проходящих через начало координат $\mathbf{0}$ и называемых направляющими гиперплоскостями. Прямая, параллельная или совпадающая с прямой, образованной пересечением каких-нибудь $n - 1$ направляющих гиперплоскостей, называется O -прямой.

Будем говорить, что множество направлений O соответствует множеству направляющих гиперплоскостей O , если порождаемые ими системы O -прямых совпадают, т. е. они образуют одну и ту же частичную выпуклость.

Основные результаты. Заметим, что ориентация O_X тесно связана с рецессивным (характеристическим) конусом полупространства X . Напомним, что рецессивным (характеристическим) конусом множества X называется множество $\mathbf{0}^+X$, состоящее из векторов $h \in R^n$ таких, что $x + \gamma h \in X$ для всех $x \in X$ и всех действительных чисел $\gamma \geq 0$. Через $CH[O_X]$ обозначим выпуклую коническую оболочку множества O_X , т. е. наименьший выпуклый конус, содержащий O_X . Через \bar{A} обозначим замыкание произвольного множества $A \subseteq R^n$. Нетрудно убедиться, что $O_X = O \cap \mathbf{0}^+X$. Тогда имеет место

Лемма. Для любой точки a направленного полупространства X частичной выпуклости множество $a + \overline{CH[O_X]}$ целиком содержится в X .

Доказательство. Известно, что рецессивный конус любого замкнутого множества является замкнутым и выпуклым [4, 5]. Тогда справедливо включение $\overline{CH[O_X]} \subseteq \mathbf{0}^+X$. Отметим, что для любой точки $a \in X$ выполняется утверждение $a + \mathbf{0}^+X \subseteq X$. Следовательно, $a + \overline{CH[O_X]} \subseteq X$. Лемма доказана.

Итак, справедлива следующая теорема, подтверждающая гипотезу Финка – Вуда.

Теорема. Если множество направляющих гиперплоскостей частичной выпуклости O' является замыканием некоторого множества O , то множество X является замкнутым направленным полупространством частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O' тогда и только тогда, когда X – замкнутое направленное полупространство частичной выпуклости с множеством направляющих гиперплоскостей O .

Доказательство. Удобно перейти от задания частичной выпуклости с помощью направляющих гиперплоскостей O к соответствующему ему заданию с помощью множества направлений (единичных векторов) O . Нетрудно видеть, что множество направляющих гиперплоскостей O' соответствует множеству направлений O' , где O' – замыкание множества O . Из леммы вытекает, что замкнутое множество X будет являться направленным полупространством частичной выпуклости с множеством направлений O' тогда и только тогда, когда X – направленное полупространство частичной выпуклости с множеством направлений O . Теорема доказана.

Заключение. Приведено положительное решение гипотезы Финка – Вуда о замкнутых направленных полупространствах частичной выпуклости.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Института математики Национальной академии наук Беларуси в рамках Государственной программы фундаментальных исследований «Конвергенция 2020».

Acknowledgements. This work was funded by the Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus within the framework of “Convergence” State Program for Fundamental Research.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Rawlins, G. Ortho-convexity and its generalizations / G. Rawlins, D. Wood // *Computational Morphology* / ed. G. T. Toussaint. – Amsterdam: North-Holland, 1988. – P. 137–152. <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-70467-2.50015-1>
2. Fink, E. *Restricted-Orientation Convexity. Series: Monographs in Theoretical Computer Science. An EATCS Series* / E. Fink, D. Wood. – Berlin; New York: Springer-Verlag, 2004. – 120 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-18849-7>
3. Найденко, В. Г. Частичная выпуклость / В. Г. Найденко // *Мат. заметки*. – 2004. – Т. 75, вып. 2. – С. 222–235.
4. Рокафеллар, Р. Выпуклый анализ / Р. Рокафеллар. – М.: Мир, 1973. – 469 с.
5. Гороховик, В. В. Критерий глобальной эпипишцевости множеств / В. В. Гороховик, С. Я. Гороховик // *Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук*. – 1995. – № 1. – С. 118–120.

References

1. Rawlins G., Wood D. Ortho-convexity and its generalizations. Toussaint G. T. (ed.) *Computational Morphology*. Amsterdam, North-Holland, 1988, pp. 137–152. <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-70467-2.50015-1>
2. Fink E., Wood D. *Restricted-Orientation Convexity. Series: Monographs in Theoretical Computer Science. An EATCS Series*. Berlin, New York: Springer-Verlag, 2004. 120 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-18849-7>
3. Naidenko V. G. Partial convexity. *Mathematical Notes*, 2004, vol. 75, no. 1–2, pp. 202–212. <https://doi.org/10.1023/b:matn.0000015036.94515.c0>
4. Rockafellar R. T. *Convex Analysis*. Princeton (New Jersey), Princeton University Press, 1970. 467 p.
5. Gorokhovich V. V., Gorokhovich S. Ya. Criterion of global epiLipschitzness of sets. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 1995, no. 1, pp. 118–120 (in Russian).

Информация об авторе

Найдено Владимир Григорьевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт математики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: naidenko@im.bas-net.by

Information about the author

Vladimir G. Naidenko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus (11, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: naidenko@im.bas-net.by

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)

ФІЗИКА
PHYSICS

UDC 539.21
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-411-418>

Received 13.11.2020
Поступила в редакцию 13.11.2020

**Nikolai A. Poklonski¹, Andrei I. Siahlo¹, Sergey A. Vyrko¹, Sergey V. Ratkevich¹,
Anatoli T. Vlassov¹, Yurii E. Lozovik^{2,3}, Nguyen Ngoc Hieu^{4,5}**

¹*Belarusian State University, Minsk, Belarus*

²*Institute for Spectroscopy of Russian Academy of Sciences, Troitsk, Moscow, Russia*

³*Moscow Institute of Electronics and Mathematics, National Research University
“Higher School of Economics”, Moscow, Russia*

⁴*Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Viet Nam*

⁵*Faculty of Natural Sciences, Duy Tan University, Da Nang, Viet Nam*

**THE GEOMETRY OF A BILAYER NANOSCROLL ROLLED FROM ZIGZAG
NANORIBBONS OF GRAPHENE AND BORON NITRIDE**

Abstract. Herein, an algorithm is proposed for calculating the Cartesian coordinates of a bilayer nanoscroll rolled from a zigzag graphene nanoribbon (*nzGNR*) and a commensurate boron nitride nanoribbon (*nzBNNR*) into two Archimedean spirals. The distance between the layers and the inner radius of the nanoscroll, the length and width of *nzGNR*, and the length of the chemical bond between the atoms in the ribbon are the parameters used in the algorithm. It is assumed that these parameters are equal both for *nzGNR* and *nzBNNR*.

Keywords: graphene, boron nitride, Cartesian coordinates, nanoribbon, bilayer nanoscroll

For citation. Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Vlassov A. T., Lozovik Yu. E., Hieu N. N. The geometry of a bilayer nanoscroll rolled from zigzag nanoribbons of graphene and boron nitride. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 411–418. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-411-418>

**Н. А. Поклонский¹, А. И. Сягло¹, С. А. Вырко¹, С. В. Раткевич¹, А. Т. Власов¹,
Ю. Е. Лозовик^{2,3}, Нгуен Нгок Хиеу^{4,5}**

¹*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

²*Институт спектроскопии Российской академии наук, Троицк, Москва, Россия*

³*Московский институт электроники и математики им. А. Н. Тихонова,*

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

⁴*Институт исследований и разработок высоких технологий, Университет Дуй Тан, Дананг, Вьетнам*

⁵*Факультет естественных наук, Университет Дуй Тан, Дананг, Вьетнам*

**ГЕОМЕТРИЯ ДВУХСЛОЙНОГО НАНОРУЛОНА
ИЗ ZIGZAG НАНОПОЛОСОК ГРАФЕНА И НИТРИДА БОРА**

Аннотация. Предложен алгоритм вычисления декартовых координат двухслойного нанорулона, свернутого из зигзагообразной графеновой нанополоски (*nzGNR*) и соразмерной нанополоски нитрида бора (*nzBNNR*) в две архимедовы спирали. Используемые в алгоритме параметры: расстояние между слоями и внутренний радиус нанорулона, длина и ширина *nzGNR*, длина химической связи между атомами в нанополоске (для *nzGNR* и *nzBNNR* они приняты равными).

Ключевые слова: графен, нитрид бора, декартовы координаты, нанополоска, двухслойный нанорулон

Для цитирования. Геометрия двухслойного нанорулона из zigzag нанополосок графена и нитрида бора / Н. А. Поклонский [и др.] // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 411–418 (in English). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-411-418>

Introduction. A bilayer nanoscroll consists of two fragments of graphene or boron nitride rolled into one scroll [1, 2]. It is known that the energy and electromechanical characteristics of a system of not too many atoms can be calculated by quantum chemical methods [3, 4]. Software packages that implement quantum chemical calculations require specifying the starting positions (coordinates) of the atoms that make up the system. When starting a study of new objects such as nanoscrolls using methods of computational chemistry [5], the researcher is faced with a need to algorithmize [6] the calculation of the atomic coordinates of the starting configuration [7] of the object under study according to the given parameters. Currently, algorithms for calculating the coordinates of atoms in nanoscrolls are not available. In this regard, we note work [8], in which an algorithm was proposed for calculating the coordinates of atoms in a single-layer carbon nanoscroll rolled from a *zigzag* graphene nanoribbon (zGNR) without preserving the lengths of C–C bonds.

The purpose of the present work is to propose an algorithm for calculating the coordinates of atoms in a bilayer nanoscroll from commensurate *zigzag* nanoribbons of graphene and boron nitride (Gr/BN) based on a small number of parameters while maintaining the lengths of interatomic bonds $a_{CC} = a_{BN}$ in the nanoscroll.

The nanoscroll is a spiral cylindrical surface. Cylindricity is associated with the fact known from differential geometry [9, 10] that a cylindrical surface is isometric to a plane. The coils of the nanoscroll tend to unfold and become flat, but the nanoscroll is stable in such a folded state due to the van der Waals attraction of the layers [11, 12]. The distance between layers is determined by the interaction of atoms of the neighboring layers and should approximately be the same. It is known that the distance between the coils of the Archimedean spiral is also approximately the same. Therefore, the layers of the nanoscroll in the cross section approximately give an Archimedean spiral. This determines the geometry of nanoscrolls.

On the nanoribbon the coordinate system (X, Y) is selected (length along the X axis and width along the Y axis), while for a cylindrical surface in the \mathbf{R}^3 space the Cartesian coordinate system (x, y, z) , the z axis being directed along the cylinder axis, together with a cylindrical coordinate system (r, φ, z) with polar coordinates in the xy plane are used. The unit vectors to the coordinate axes r , φ , and z will be denoted by \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 , and \mathbf{k} , respectively. The curve along which the surface bends is given in the xy plane in polar coordinates (r, φ) by the equation $\mathbf{r} = f(\varphi) \mathbf{e}_1(\varphi) = s\varphi(X) \mathbf{e}_1(\varphi)$, and the isometric mapping of the nanoribbon to the surface by the equation $\mathbf{r} = s\varphi(X) \mathbf{e}_1(\varphi) + y\mathbf{k}$.

The mathematical basis of the proposed constructions is the existence of an isometric map of a nanoribbon onto a cylindrical spiral surface: $(X, Y) \rightarrow (x, y, z) = (s\varphi(X), \varphi(X), Y)$. The nanoribbons under consideration are the fragments of two-dimensional crystals, on the nodes of which a translation group acts (locally). Due to the incompleteness of the nanoribbon, this is a local action. Isometry makes it possible to transfer the action of this group from the nanoribbon to the surface and to restore the lattice there using transformations of the group of a two-dimensional crystal lattice (see, e.g., [13]).

Atomic coordinates in nanoribbons. Figure 1 shows the structures of a flat carbon nanoribbon 46zGNR (a) and a bilayer Gr/BN nanoscroll (b) with an inner radius R_{in} of 1 nm, rolled from graphene and boron nitride nanoribbons in the form of two cylindrical surfaces formed by Archimedean spirals.

The length of a *zigzag* graphene nanoribbon nz GNR, from which the nanoscroll is rolled, is $L = (3n/2 - 1)a_{CC}$, where n is the number of *zigzag* chains along the length of the ribbon (along the X axis in Fig. 1, a), $a_{CC} = 0.142$ nm is the distance between the nearest carbon atoms. Thus, for the 46zGNR carbon nanoribbon ($n = 46$), the length L is 9.66 nm. The length of a commensurate nanoribbon of boron nitride 46zBNNR with the number of *zigzag* chains is $L = (3n/2 - 1)a_{BN}$. We assume that the distance between neighboring B and N atoms in a flat boron nitride nanoribbon is equal to the distance between neighboring carbon atoms in a flat graphene nanoribbon, i.e., $a_{BN} = a_{CC}$.

The atomic coordinates of the flat *zigzag* bilayer nanoribbon are determined by four indices (Fig. 1, a): the index q takes the values A and B or B and N and corresponds to two atoms in the unit cell of nz GNR or nz BNNR, the index i is the number of the unit cell along the length of the ribbon L , the index j is the number of the unit cell along the width of the ribbon W , and the index k is the number of the layer. The coordinates of the bilayer atoms in the AA configuration (when the X, Y coordinates of the atoms in both layers coincide) are given by the formulas:

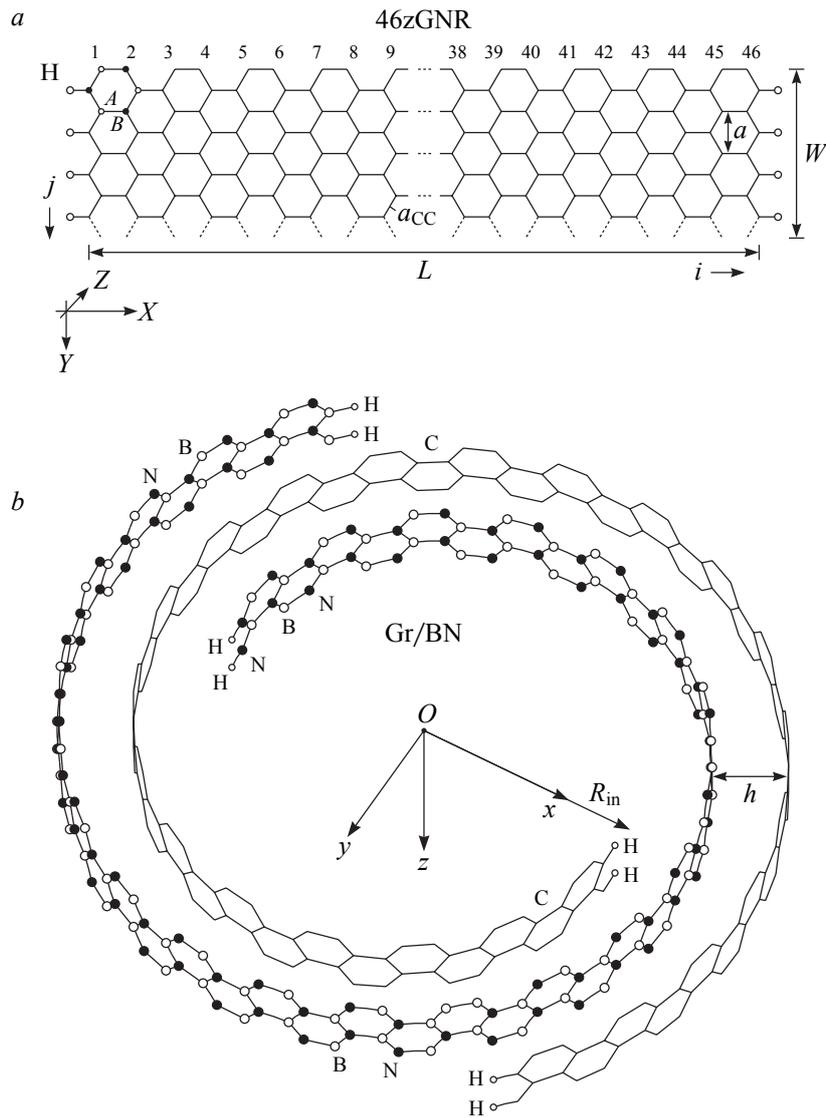


Fig. 1. The structure of a computational cell of width W for a flat 46zGNR nanoribbon of length L (a) and for a Gr/BN bilayer nanoscroll with the inner radius $R_{in} = 1$ nm (b). Here $n = 46$ zigzag chains of carbon atoms constituting 46zGNR are enumerated; $a_{CC} = a_{BN}$ is the bond length in the graphene and boron nitride nanoribbons, a is the translation period, and h is the distance between the layers (nanoribbons); the z axis is directed along the nanoscroll

$$\begin{aligned}
 X_{Aij1} &= (3/2)(i-1)a_{CC}, & X_{Bij1} &= X_{Aij1} + a_{CC}, \\
 X_{Bij2} &= (3/2)(i-1)a_{BN}, & X_{Nij2} &= X_{Nij2} + a_{BN}, \\
 Y_{qijk} &= (j-1)a + a/2 \quad \text{for odd } i, \\
 Y_{qijk} &= (j-1)a \quad \text{for even } i, \\
 Z_{qijk} &= (k-1)h,
 \end{aligned} \tag{1}$$

where $a = \sqrt{3} a_{CC}$ is the translation period of the bilayer (along the Y axis) and $h = 0.335$ nm is the distance between the layers.

The free zigzag edges of both nanoribbons are passivated by hydrogen atoms located at a distance of $a_{CH} = 0.1091$ nm from carbon atoms along the X axis in nz GNR, and $a_{BH} = 0.119$ nm from boron and $a_{NH} = 0.1008$ nm from nitrogen atoms in nz BNNR.

Atomic coordinates in nanoscrolls. Two nanoribbons of graphene and boron nitride, rolled around an axis perpendicular to the length of the ribbon (around the y axis in Fig. 1, a), form the bilayer Gr/BN nanoscroll, as shown in Fig. 1, b. (Note that the bilayer nanoscroll can also be rolled from a graphene

and boron nitride bilayer when the initial angular coordinates of the layers coincide.) The cross section of the nanoscroll is two Archimedean spirals with a distance between the adjacent layers $h = 0.335$ nm. Each atom is characterized by four indices: q corresponds to two atoms in the unit cell of graphene (takes the values A and B or B and N for the boron nitride unit cell); i is the number of the unit cell of graphene along the length L (from 1 to n_l); j is the number of the unit cell of graphene along the width (from 1 to n_w); and k is the layer number for a multilayer nanoscroll (from 1 to n_h). For the bilayer nanoscroll made of graphene and boron nitride, we assume $k = 1$ for the graphene layer and $k = n_h = 2$ for the boron nitride layer. The Cartesian coordinates of nanoscroll atoms $(x_{qijk}, y_{qijk}, z_{qijk})$ through the cylindrical coordinates $(R_{qijk}, \varphi_{qijk}, z_{qijk})$ are represented as follows:

$$\begin{aligned} x_{qijk} &= R_{qijk} \cos(\varphi_{qijk}), & y_{qijk} &= R_{qijk} \sin(\varphi_{qijk}), \\ z_{qijk} &= (j - 1)a + a/2 & \text{for odd } i, \\ z_{qijk} &= (j - 1)a & \text{for even } i, \end{aligned} \tag{2}$$

where $R_{qijk} = n_h h \varphi_{qij1} / 2\pi$ is the polar radius of the nanoscroll atom corresponding to the angle $\varphi_{qijk} = \varphi_{qij1} + (k - 1)2\pi/n_h$ in the layer with number k , and $a = \sqrt{3} a_{CC}$ is the scroll translation period along the z axis. Note that we use different coordinate systems for the nanoscroll and nanoribbons. For nanoribbon, the X axis is directed along its length L , and for the nanoscroll, the xy plane is perpendicular to its axis. Let us consider two methods for finding the unknown angle φ_{qij1} .

The first method. Let us consider an approximate method for describing a nanoscroll, when the distances between atoms in a flat nanoribbon are equal to the distances on a curved surface bent along an Archimedean spiral (isometric mapping of a nanoribbon onto a cylindrical surface). In this case, the distances between neighboring atoms in the nanoscroll are not equal to the interatomic distances a_{CC} in flat nanoribbons (Fig. 1). The unknown angle φ_{qij1} is found from the equation $X_{qij1} = \Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1})$, where $X_{Aij1} (= X_{Bij2}) = (3/2)(i - 1)a_{CC}$, $X_{Bij1} (= X_{Nij2}) = X_{Aij1} + a_{CC}$ are the coordinates of atoms in the graphene (and boron nitride) layer along the X axis of the corresponding flat nanoribbon (see also Eq. (1)), $\Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1})$ is the length of the Archimedean spiral with a helix pitch distance $n_h h$, an initial angle φ_{in} , and a final angle φ_{qij1} .

$$\begin{aligned} \Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1}) &= \int_{\varphi_{in}}^{\varphi_{qij1}} \frac{n_h h}{2\pi} \sqrt{1 + \varphi^2} d\varphi = \frac{n_h h}{4\pi} \left[\varphi_{qij1} \sqrt{1 + \varphi_{qij1}^2} - \varphi_{in} \sqrt{1 + \varphi_{in}^2} + \right. \\ &\quad \left. + \ln \left(\varphi_{qij1} + \sqrt{1 + \varphi_{qij1}^2} \right) - \ln \left(\varphi_{in} + \sqrt{1 + \varphi_{in}^2} \right) \right]. \end{aligned} \tag{3}$$

The initial angle φ_{in} of a nanoscroll is expressed through the inner radius R_{in} as follows: $\varphi_{in} = 2\pi R_{in} / n_h h + (k - 1)2\pi/n_h$. Expression (3) for the length of the spiral at angles large enough, compared to unity, can be approximately written in the form:

$$\Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1}) \approx \frac{n_h h}{4\pi} (\varphi_{qij1}^2 - \varphi_{in}^2). \tag{4}$$

Approximate relation (4) for the spiral length $\Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1})$ allows us to analytically solve the equation $X_{qij1} = \Lambda(\varphi_{in}, \varphi_{qij1})$ with respect to the unknown angle:

$$\varphi_{qij1} = \sqrt{4\pi X_{qij1} / n_h h + \varphi_{in}^2}.$$

In order to start the nanoscroll from a zero angle in cylindrical coordinates (correspondingly from the x axis in Cartesian coordinates), the Archimedean spiral can be represented in the form: $R_{qijk} = R_{in} + n_h h (\varphi_{qij1} - \varphi_0) / 2\pi$, where $\varphi_0 = 2\pi R_{in} / n_h h$ and parameter $n_h = 2$ for a bilayer nanoscroll. Thus, the Cartesian coordinates (x_{qijk}, y_{qijk}) in Eq. (2) can be rewritten as follows: $x_{qijk} = R_{qijk} \cos(\varphi_{qijk} - \varphi_0)$, $y_{qijk} = R_{qijk} \sin(\varphi_{qijk} - \varphi_0)$.

The second method. In some cases, it may be necessary to take into account the difference between the arc and chord lengths on the spiral surface of the nanoscroll. This difference depends on the curvature K of the surface, which at the point with the current radius $r = s\varphi$ is [10, 14]:

$$K(r) = \frac{r^2 + 2s^2}{(r^2 + s^2)^{3/2}}.$$

If $r \gg s$, then the curvature of the Archimedean spiral is $K \approx 1/r$, as for a circle of radius r . For a circle, the difference between the length of the chord l and the length of the corresponding arc D is of the third order by D , namely $D^3/24r^2$. Indeed, the length of the chord $l = 2r \sin(\Delta\varphi/2)$, the length of the arc $D = r\Delta\varphi$, expanding into a series in powers of $\Delta\varphi$, we obtain $l \approx r\Delta\varphi - r(\Delta\varphi)^3/24 = D - D(\Delta\varphi)^2/24$, i.e., $D - l \approx D(\Delta\varphi)^2/24 = D^3/24r^2$. Then the difference between the lengths of the spiral and the n -chord spiral on one turn can be estimated as $n(D - l) \approx nD(D^2/24r^2) = 2\pi r(D^2/24r^2) \approx 2\pi r(l^2/24r^2)$.

Now we select the mapping of a nanoribbon to a nanoscroll, in which the distances between neighboring atoms in the nanoscroll are equal to the distances $a_{CC} = a_{BN}$ in flat ribbons. Let there be two points on the plane $A = (X_0, Y_0)$ and $B = (X_1, Y_1)$ related to neighboring atoms. The mapping onto a cylindrical surface is given by the formula:

$$(X, Y) \rightarrow (x, y, z) = (r(\varphi) \cos(\varphi), r(\varphi) \sin(\varphi), Y).$$

The surface is constructed along the spiral $r(\varphi) = s\varphi$, where $s = n_h h/2\pi$. Points A and B transfer to the following points, respectively

$$\begin{aligned} A' &= (r(\varphi_0) \cos(\varphi_0), r(\varphi_0) \sin(\varphi_0), Y_0), \\ B' &= (r(\varphi_1) \cos(\varphi_1), r(\varphi_1) \sin(\varphi_1), Y_1). \end{aligned}$$

Let the angle φ_0 be known for the point A' and we need to determine φ_1 . Let us find the angle φ_1 for the point B' from the equality of the distances between the original points and their images: $|AB| = |A'B'|$. Transforming the left and the right sides of this equation in accordance with the Pythagorean theorem, we have

$$\begin{aligned} |A'B'|^2 &= (r(\varphi_1) \cos \varphi_1 - r(\varphi_0) \cos \varphi_0)^2 + (r(\varphi_1) \sin \varphi_1 - r(\varphi_0) \sin \varphi_0)^2 + (Y_1 - Y_0)^2, \\ |AB|^2 &= (X_1 - X_0)^2 + (Y_1 - Y_0)^2. \end{aligned}$$

Equating the right-hand sides, we get

$$(X_1 - X_0)^2 = r^2(\varphi_1) + r^2(\varphi_0) - 2r(\varphi_1)r(\varphi_0) \cos(\varphi_1 - \varphi_0). \tag{5}$$

This relation is the law of cosines for the length $|A'B'|$ of a spiral chord (Fig. 2).

To implement this folding method, it is necessary to transform the indexing of X_{qij1} coordinates over the first two indices q, i into one “doubled” index p , which is sequentially run through the atoms in the j th *armchair* chain (Fig. 1, *a*).

Using Eq. (5), we write the equation for the desired angle $\varphi_{(p+1)j1}$ from the known angle φ_{pj1} while maintaining the interatomic distances:

$$(X_{(p+1)j1} - X_{pj1})^2 = (n_h h / 2\pi)^2 \left[(\varphi_{(p+1)j1})^2 + (\varphi_{pj1})^2 - 2\varphi_{(p+1)j1}\varphi_{pj1} \cos(\varphi_{(p+1)j1} - \varphi_{pj1}) \right], \tag{6}$$

where $\varphi_{1j1} = 2\pi R_{in}/n_h h$ is the initial angle of the spiral.

Equation (6) is nonlinear and can be solved numerically. Since the cosine is an even periodic function, you should take guess values of the angles close to the desired ones, otherwise the numerical solution method can find roots with negative angles or roots that differ from the desired ones by a multiple of 2π . It is convenient to take the following approximate values as the guess values:

$$\varphi_{(p+1)j1} = \sqrt{(4\pi/n_h h)X_{(p+1)j1} + \varphi_{in}^2},$$

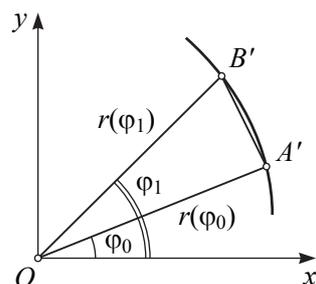


Fig. 2. On the determination of the length of the spiral chord $|A'B'|$ from the law of cosines

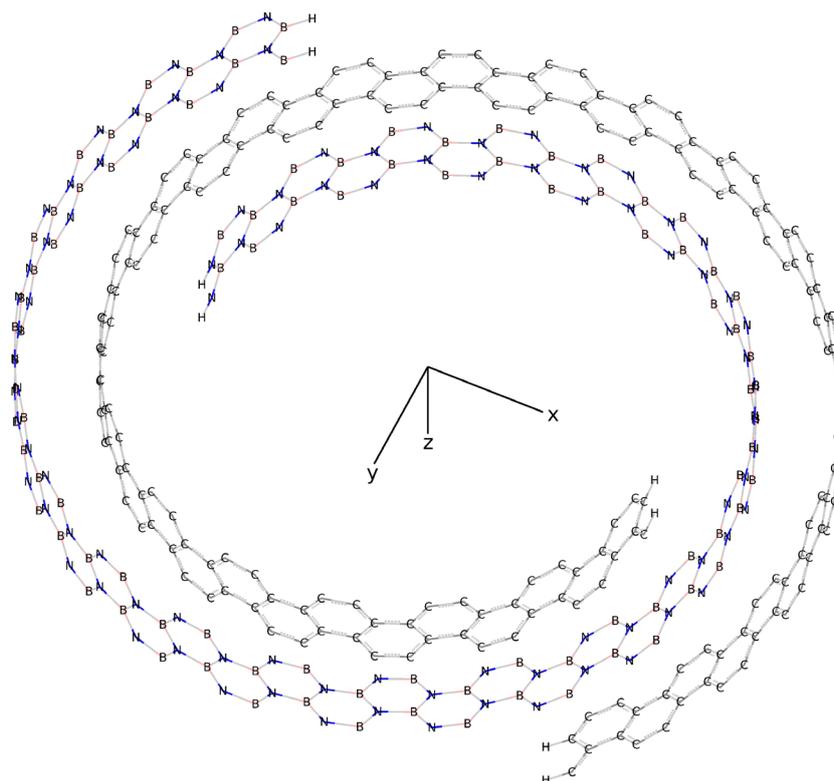


Fig. 3. A computational cell for a bilayer Gr/BN nanoscroll rolled from a 46zGNR graphene nanoribbon and a commensurate 46zBNNR boron nitride nanoribbon with the inner radius $R_{in} = 1$ nm displayed in the graphical interface GaussView; the z axis of the Cartesian coordinate system is directed along the nanoscroll

found from Eq. (4). Or even simpler (approximating spiral arcs by circular arcs of the corresponding radius):

$$\varphi_{(p+1)j1} = \varphi_{pj1} + \left[(X_{(p+1)j1} - X_{pj1}) / r(\varphi_{pj1}) \right].$$

The Cartesian coordinates of a bilayer Gr/BN nanoscroll with equal bond lengths $a_{CC} = a_{BN}$ obtained using the proposed algorithm are suitable for use in standard software packages for quantum chemical calculations (Fig. 3). The data to reproduce these findings are available to download [15].

Conclusion. An algorithm for calculating the Cartesian coordinates of the atoms of a bilayer nanoscroll in the form of two Archimedean spirals is proposed. The length and width of the graphene and boron nitride nanoribbons, the distance between adjacent layers, the inner radius of the nanoscroll, and the distance between neighboring atoms in flat *zigzag* nanoribbons are the parameters defining the nanoscroll. The starting configurations of nanoscrolls with equal bond lengths, folded from *zigzag* nanoribbons of graphene and boron nitride, are constructed, which are suitable for calculating the parameters of nanoscrolls by quantum chemical methods.

Acknowledgements. The work was supported by the Belarusian National Research Program “Convergence-2020” and the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant no. Ф20Р-301). Yuri E. Lozovik acknowledge support by the Russian Foundation of Basic Research (grant no. 20-52-00035) and the Program for Basic Research of the National Research University “Higher School of Economics”. Nguyen Ngoc Hieu acknowledge support by the Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under grant no. 103.01-2017.309.

Благодарности. Работа поддержана Государственной программой научных исследований «Конвергенция-2020» Республики Беларусь и Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант № Ф20Р-301). Ю. Е. Лозовик благодарит за поддержку Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 20-52-00035) и Программу фундаментальных исследований Национального исследовательского института «Высшая школа экономики». Нгуен Нгок Хиеу благодарит за поддержку Вьетнамский национальный фонд развития науки и технологий (NAFOSTED) в рамках гранта № 103.01-2017.309.

References

1. Siahlo A. I., Poklonski N. A., Lebedev A. V., Lebedeva I. V., Popov A. M., Vyrko S. A., Knizhnik A. A., Lozovik Yu. E. Structure and energetics of carbon, hexagonal boron nitride, and carbon/hexagonal boron nitride single-layer and bilayer nanoscrolls. *Physical Review Materials*, 2018, vol. 2, no. 3, pp. 036001 (1–9). <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.036001>
2. Perim E., Galvão D. S. The structure and dynamics of boron nitride nanoscrolls. *Nanotechnology*, 2009, vol. 20, no. 33, pp. 335702 (1–6). <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/33/335702>
3. Lewars E. G. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Berlin, Springer, 2016. xvi+728 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-30916-3>
4. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Siahlo A. I., Poklonskaya O. N., Ratkevich S. V., Hieu N. N., Kocherzhenko A. A. Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design. *Materials Research Express*, 2019, vol. 6, no. 4, pp. 042002 (1–25). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aafblc>
5. Cramer C. J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. Chichester, Wiley, 2004. xxii+596 p.
6. Cormen T. H., Leiserson C. E., Rivest R. L., Stein C. *Introduction to Algorithms*. Cambridge, MIT Press, 2009. xx+1292 p.
7. Brázdová V., Bowler D. R. *Atomistic Computer Simulations: A Practical Guide*. Weinheim, Wiley-VCH, 2013. xxx+332 p. <https://doi.org/10.1002/9783527671816>
8. Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Poklonski N. A., Vlassov A. T., Hieu N. N., Lozovik Yu. E. Quantum chemical calculations of carbon nanoscroll energy rolled from zigzag graphene nanoribbon. *Semiconductors*, 2020, vol. 54, no. 12, pp. 1678–1681. <https://doi.org/10.1134/s1063782620120350>
9. Rashevskii P. K. *Course of Differential Geometry*. Moscow, GITTL, 1956. 420 p. (in Russian).
10. Kühnel W. *Differential Geometry: Curves, Surfaces, Manifolds*. Providence, AMS, 2015. xii+402 p.
11. Yankowitz M., Ma Q., Jarillo-Herrero P., LeRoy B. J. van der Waals heterostructures combining graphene and hexagonal boron nitride. *Nature Reviews Physics*, 2019, vol. 1, no. 2, pp. 112–125. <https://doi.org/10.1038/s42254-018-0016-0>
12. Galashev A. E., Rakhmanova O. R. Mechanical and thermal stability of graphene and graphene-based materials. *Physics Uspekhi*, 2014, vol. 57, no. 10, pp. 970–989. <https://doi.org/10.3367/UFNe.0184.201410c.1045>
13. Poklonski N. A., Vlassov A. T., Vyrko S. A. *Finite Symmetry Groups: Fundamentals and Applications*. Minsk, P. Brouka Belarusian Encyclopedia, 2011. 464 p. (in Russian).
14. Archimedean spiral. Prokhorov Yu. V. (ed.) *Mathematical Encyclopedic Dictionary*. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1988. pp. 80 (in Russian).
15. Vyrko S. A., Siahlo A. I., Poklonski N. A., Vlassov A. T., Ratkevich S. V., Lozovik Yu. E., Hieu N. N. Data for: Geometry of bilayer nanoscroll rolled from zigzag nanoribbons of graphene and boron nitride. *Mendeley Data*. 2020. <https://doi.org/10.17632/rz57w938fs>

Information about the authors

Nikolai A. Poklonski – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Andrei I. Siahlo – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: siahloa@bsu.by

Sergey A. Vyrko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vyrko@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-1145-1099>

Sergey V. Ratkevich – Senior Lecturer, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk,

Информация об авторах

Поклонский Николай Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Сягло Андрей Иванович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: siahloa@bsu.by

Вырко Сергей Александрович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vyrko@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-1145-1099>

Republic of Belarus). E-mail: ratkevich@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-5161-5510>

Anatoli T. Vlassov – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: avlassov@bsu.by

Yurii E. Lozovik – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of the Spectroscopy of Nanostructures, Institute for Spectroscopy of Russian Academy of Sciences (5, Fizicheskaya Str., 108840, Troitsk, Moscow, Russian Federation). E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru. <http://orcid.org/0000-0003-0398-5485>

Nguyen Ngoc Hieu – Ph. D. (Physics and Mathematics), Director of the Center for Materials Science, Institute of Research and Development, Duy Tan University (03, Quang Trung, 550000, Da Nang, Viet Nam). E-mail: hieunn@duytan.edu.vn. <https://orcid.org/0000-0001-5721-960X>

Раткевич Сергей Владимирович – старший преподаватель, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: ratkevich@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-5161-5510>

Власов Анатолий Тимофеевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: avlassov@bsu.by

Лозовик Юрий Ефремович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией спектроскопии наноструктур, Институт спектроскопии РАН (ул. Физическая, 5, 108840, г. Троицк, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru. <http://orcid.org/0000-0003-0398-5485>

Нгуен Нгок Хиеу – кандидат физико-математических наук, директор Центра материаловедения, Институт исследований и разработок высоких технологий, Университет Дуй Тан (03, Куанг Чунг, 550000, Дананг, Вьетнам). E-mail: hieunn@duytan.edu.vn. <http://orcid.org/0000-0001-5721-960X>

ISSN 1561-2430 (Print)
 ISSN 2524-2415 (Online)
 УДК 530.145
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-419-435>

Поступила в редакцию 22.06.2020
 Received 22.06.2020

Я. А. Войнова¹, Н. Г. Крылова^{2,3}, Е. М. Овсиюк⁴

¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

³Белорусский государственный аграрный технический университет, Минск, Беларусь

⁴Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина, Мозырь, Беларусь

ПАУЛИЕВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ВЕКТОРНОЙ ЧАСТИЦЫ С АНОМАЛЬНЫМ МАГНИТНЫМ МОМЕНТОМ ВО ВНЕШНЕМ КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ

Аннотация. Исследуется частица со спином 1 и аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле. Исходной является релятивистская тензорная система уравнений типа Прока в декартовой системе координат. В этих уравнениях присутствует параметр Γ , связанный с дополнительной характеристикой частицы. В случае внешнего магнитного поля он интерпретируется как аномальный магнитный момент. Дополнительные члены взаимодействия появляются также и при наличии электрического поля, причем в этом случае есть члены первого и второго порядков по параметру Γ . Детально рассматривается случай внешнего кулоновского поля. Проведена процедура нерелятивистского приближения, получено уравнение паулиевского типа. В нерелятивистском уравнении проведено разделение переменных с использованием аппарата шаровых векторов. Получено одно отдельное радиальное уравнение второго порядка, в котором дополнительные члены взаимодействия отсутствуют. Кроме того, выведена система двух связанных уравнений второго порядка, в них присутствуют линейные и квадратичные по параметру Γ дополнительные члены взаимодействия. Ранее был развит другой подход к анализу векторной частицы с аномальным магнитным моментом, основанный на использовании тетрадного формализма и разделении переменных в уравнении Даффина – Кеммера с применением функций Вигнера, после чего процедура нерелятивистского приближения была выполнена непосредственно в радиальной системе уравнений. Были построены в явном виде формальные решения Фробениуса возникающего уравнения 4-го порядка, однако физически интерпретируемых спектров получить не удалось. Показано, что полученные разными методами нерелятивистские радиальные уравнения совпадают с точностью до простого линейного преобразования над двумя функциями. В настоящей работе получено более простое уравнение 4-го порядка, при этом построение решений Фробениуса технически проще, но найти физически интерпретируемые спектры также не удается.

Ключевые слова: частица со спином 1, аномальный магнитный момент, кулоновское поле, решения Фробениуса, квантование энергии

Для цитирования. Войнова, Я. А. Паулиевское приближение для векторной частицы с аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле / Я. А. Войнова, Н. Г. Крылова, Е. М. Овсиюк // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 419–435. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-419-435>

Yanina A. Voynova¹, Nina G. Krylova^{2,3}, Elena M. Ovsyuk⁴

¹B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

²Belarusian State University, Minsk, Belarus

³Belarusian State Agrarian Technical University, Minsk, Belarus

⁴Mozyr State Pedagogical University named after I. P. Shamyakin, Mozyr, Belarus

PAULI APPROXIMATION FOR A VECTOR PARTICLE WITH ANOMALOUS MAGNETIC MOMENT IN AN EXTERNAL COULOMB FIELD

Abstract. Herein, a spin 1 particle with anomalous magnetic moment in an external Coulomb field is studied. We start with the relativistic tensor system of the Proca type in Cartesian coordinates. In these equations the Γ parameter is present related to an additional characteristic of the particle. In the case of an external magnetic field, it is interpreted as an anomalous magnetic moment. In the presence of an external electric field, additional interaction terms are presented as well; moreover, the terms of the first and second orders in parameter Γ appear. The case of an external Coulomb field is considered in detail. In the nonrelativistic approximation a Pauli type equation is obtained. In the nonrelativistic equation the separation of the variables with the use of spherical vectors is realized. One separate 2-nd order differential equation is found, in which additional interaction terms are missing. Besides, we derive systems of two coupled 2-nd order equations wherein linear and quadratic

in parameter Γ interaction terms are presented. Previously, another approach was developed for analyzing the vector particle with anomalous magnetic moment. It was based on the use of tetrad formalism and separation of the variables in the Duffin – Kemmer equation with the help of the Wigner function. The nonrelativistic approximation was performed directly in the system of radial equations. Besides, previously formal Frobenius type solutions for an arising 4-th order differential equation were constructed; however, physically interpretable energy spectra were not found. We have proved that the radial equations derived by different methods are the same up to a simple linear transformation over two radial functions. In this paper, we have obtained a simpler 4-th order equation, the construction of Frobenius solutions becomes technically easier, but physical energy spectra are not found either.

Keywords: spin 1 particle, anomalous magnetic moment, Coulomb field, Frobenius solutions, energy quantization

For citation. Voynova Ya. A., Krylova, N. G., Ovsyuk E. M. Pauli approximation for a vector particle with anomalous magnetic moment in an external Coulomb field. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 419–435 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-419-435>

Введение. Известно, что в рамках теории релятивистских волновых уравнений можно предложить так называемые неминимальные уравнения, которые описывают частицы с дополнительными электромагнитными характеристиками. В частности, интенсивно исследовались [1–13] уравнения для частиц со спином 1, обладающих помимо электрического заряда аномальным магнитным моментом. До настоящего времени такое обобщенное уравнение главным образом решалось в присутствии внешних однородных магнитного и электрического полей [14–18]. Уравнение для векторной частицы в случае внешнего кулоновского поля оказывается очень сложным даже в случае обычной частицы без аномального момента, и эта задача все еще не решена полностью [19, 20]. Однако в нерелятивистском пределе уравнение для обычной векторной частицы в кулоновском поле решается точно [19]. В настоящей работе мы исследуем аналогичную нерелятивистскую задачу для частицы с аномальным магнитным моментом.

Исходной является релятивистская тензорная система уравнений типа Прока в декартовой системе координат, обобщенная так, чтобы учесть аномальный магнитный момент частицы. В этих уравнениях присутствует дополнительный параметр Γ , определяющий дополнительную характеристику частицы. В случае внешнего магнитного поля он интерпретируется как аномальный магнитный момент. Дополнительные члены взаимодействия появляются также и при наличии электрического поля, причем есть члены, пропорциональные и первой, и второй степеням параметра Γ . Эти взаимодействия являются соответственно линейными и квадратичными по электрическому полю. Детально рассматривается случай внешнего кулоновского поля. С использованием аппарата шаровых векторов проведено разделение переменных. В систему радиальных уравнений входит одно отдельное уравнение, в котором дополнительные члены взаимодействия отсутствуют; два других уравнения образуют связанную подсистему, в которой присутствуют дополнительные члены, линейные и квадратичные по параметру Γ .

В [21] был развит другой подход к анализу нерелятивистской векторной частицы с аномальным магнитным моментом в кулоновском поле. Он основывался на использовании тетрадного формализма и проведении процедуры нерелятивистского приближения в найденной после разделения переменных радиальной системе уравнений. В настоящей работе показано, что полученные разными методами нерелятивистские радиальные уравнения совпадают с точностью до простого линейного преобразования над двумя радиальными функциями. Соответственно нет необходимости повторно выполнять ту часть вычислений, которая была сделана в статье [21]. В частности, там были построены в явном виде формальные решения Фробениуса возникающих уравнений 2-го и 4-го порядков, однако физически интерпретируемых спектров получить не удалось. На основе выделения так называемых трансцендентных решений [22, 23] возникают лишь некие вырожденные формулы для энергии: они разумны по знаку и величине, но не зависят от квантового числа полного момента и параметра Γ . В настоящей работе получены более простые уравнения 4-го порядка. Это упрощение обусловлено отсутствием регулярной особой точки, дополнительной к физическим сингулярным точкам $r = 0$ и $r = \infty$. Построение решений Фробениуса этих уравнений технически проще, но найти физически интерпретируемые спектры, за исключением неких вырожденных примеров, также не удастся. В случае минимального значения полного момента в нерелятивистском пределе возникает одно радиальное уравнение, оно

сводится к дважды вырожденному уравнению Гойна, но найти соответствующий полный спектр энергий также не удается.

Нерелятивистское приближение. В тензорной форме учитывающие аномальный магнитный момент частицы обобщенные уравнения Прока имеют вид

$$D_a \Psi_b - D_b \Psi_a = m \Psi_{ab}, \quad D^b \Psi_{ab} + \frac{2ie'\lambda}{m} F_{ab} \Psi^b = m \Psi_a;$$

здесь $e' = e / \hbar c, m = Mc / \hbar, D_a = \partial_a - ie'A_a$, параметр λ безразмерный. Сделаем в этих уравнениях (3 + 1)-расщепление:

$$D_0 \Psi_k - D_k \Psi_0 = m \Psi_{0k}, \quad D_k \Psi_l - D_l \Psi_k = m \Psi_{kl},$$

$$D^l \Psi_{0l} + \frac{2ie'\lambda}{m} F_{0l} \Psi^l = m \Psi_0, \quad D^0 \Psi_{k0} + \frac{2ie'\lambda}{m} F_{k0} \Psi^0 + D^l \Psi_{kl} + \frac{2ie'\lambda}{m} F_{kl} \Psi^l = m \Psi_k.$$

Дальше используем обозначение $2ie'\lambda / m = \Gamma$, тогда предыдущие уравнения запишутся так:

$$D_0 \Psi_k - D_k \Psi_0 = m \Psi_{0k}, \quad D_k \Psi_l - D_l \Psi_k = m \Psi_{kl},$$

$$D^l \Psi_{0l} + \Gamma F_{0l} \Psi^l = m \Psi_0, \quad D^0 \Psi_{k0} + \Gamma F_{k0} \Psi^0 + D^l \Psi_{kl} + \Gamma F_{kl} \Psi^l = m \Psi_k.$$

Исключим из уравнений нединамические переменные Ψ_0 и Ψ_{kl} , в результате получим

$$m \Psi_k = D^0 \Psi_{k0} + \frac{\Gamma}{m} F_{k0} (D^l \Psi_{0l} - \Gamma F_{0l} \Psi^l) + \frac{1}{m} D^l (D_k \Psi_l - D_l \Psi_k) - \Gamma F_{kl} \Psi^l, \quad (1)$$

$$m \Psi_{0k} = D_0 \Psi_k - \frac{1}{m} D_k (D^l \Psi_{0l} - \Gamma F_{0l} \Psi^l), \quad (2)$$

все тензорные индексы опущены вниз. В уравнениях (1) и (2) перегруппируем слагаемые, выделив обусловленные аномальным моментом:

$$m \Psi_k = \left\{ D^0 \Psi_{k0} + \frac{1}{m} D^l (D_k \Psi_l - D_l \Psi_k) \right\} + \left\{ \frac{\Gamma}{m} F_{k0} D^l \Psi_{0l} - \Gamma F_{kl} \Psi^l - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} \Psi^l \right\}, \quad (3)$$

$$m \Psi_{0k} = \left\{ D_0 \Psi_k - \frac{1}{m} D_k D^l \Psi_{0l} \right\} + \frac{\Gamma}{m} D_k F_{0l} \Psi^l. \quad (4)$$

Нерелятивистские (большие и малые) компоненты вводим равенствами [24]:

$$B_k = \frac{1}{2} (\Psi_k + i \Psi_{0k}), \quad M_k = \frac{1}{2} (\Psi_k - i \Psi_{0k}); \quad \Psi_k = B_k + M_k, \quad \Psi_{0k} = -i (B_k - M_k).$$

Комбинируем уравнения (3) и (4) так, чтобы слева были выражения $(\Psi_k \pm i \Psi_{0k})$:

$$m (\Psi_k + i \Psi_{0k}) = \left\{ i D_0 (\Psi_k + i \Psi_{0k}) + \frac{1}{m} D^l (D_k \Psi_l - D_l \Psi_k) - \frac{i}{m} D_k D^l \Psi_{0l} \right\} +$$

$$+ \left\{ \frac{\Gamma}{m} F_{k0} D^l \Psi_{0l} - \Gamma F_{kl} \Psi^l - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} \Psi^l + \frac{i \Gamma}{m} D_k F_{0l} \Psi^l \right\},$$

$$m (\Psi_k - i \Psi_{0k}) = \left\{ -i D_0 (\Psi_k - i \Psi_{0k}) + \frac{1}{m} D^l (D_k \Psi_l - D_l \Psi_k) + \frac{i}{m} D_k D^l \Psi_{0l} \right\} +$$

$$+ \left\{ \frac{\Gamma}{m} F_{k0} D' \Psi_{0l} - \Gamma F_{kl} \Psi_l - \frac{9\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} \Psi_l - \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} \Psi_l \right\}.$$

Перейдем в этих уравнениях к переменным B_k и M_k , а также выделим энергию покоя, используя формальные замены

$$iD_0 B_k = (iD_0 + m) B_k, \quad iD_0 M_k = (iD_0 + m) M_k,$$

после чего уравнения примут вид

$$\begin{aligned} 2mB_k &= \left\{ 2(iD_0 + m)B_k + \frac{1}{m} D' [D_k(B_l + M_l) - D_l(B_k + M_k)] - \frac{1}{m} D_k D' (B_l - M_l) \right\} + \\ &+ \left\{ -\frac{i\Gamma}{m} F_{k0} D' (B_l - M_l) - \Gamma F_{kl} (B_l + M_l) - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} (B_l + M_l) + \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} (B_l + M_l) \right\}, \\ 2mM_k &= \left\{ -2(iD_0 + m)M_k + \frac{1}{m} D' [D_k(B_l + M_l) - D_l(B_k + M_k)] + \frac{1}{m} D_k D' (B_l - M_l) \right\} + \\ &+ \left\{ -\frac{i\Gamma}{m} F_{k0} D' (B_l - M_l) - \Gamma F_{kl} (B_l + M_l) - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} (B_l + M_l) - \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} (B_l + M_l) \right\}. \end{aligned}$$

Приводим подобные, одновременно пренебрегаем малыми компонентами в сравнении с большими, в результате получаем

$$\begin{aligned} 0 &= \left\{ 2iD_0 B_k + \frac{1}{m} D' [D_k B_l - D_l B_k] - \frac{1}{m} D_k D' B_l \right\} + \\ &+ \left\{ -\frac{i\Gamma}{m} F_{k0} D' B_l - \Gamma F_{kl} B_l - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} B_l + \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} B_l \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} 4mM_k &= \left\{ -2iD_0 M_k + \frac{1}{m} D' [D_k B_l - D_l B_k] + \frac{1}{m} D_k D' B_l \right\} + \\ &+ \left\{ -\frac{i\Gamma}{m} F_{k0} D' B_l - \Gamma F_{kl} B_l - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} B_l - \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} B_l \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

Кроме того, в (6) следует пренебречь слагаемым $iD_0 M_k$ в сравнении с mM_k , тогда уравнение (6) позволит выразить малую компоненту через большую (такое же приближение присутствует и в случае вывода уравнения Паули из уравнения Дирака):

$$4mM_k = \left\{ \frac{1}{m} D' [D_k B_l - D_l B_k] + \frac{1}{m} D_k D' B_l \right\} + \left\{ -\frac{i\Gamma}{m} F_{k0} D' B_l - \Gamma F_{kl} B_l - \frac{\Gamma^2}{m} F_{k0} F_{0l} B_l - \frac{i\Gamma}{m} D_k F_{0l} B_l \right\}.$$

Уравнение (5) содержит только большую компоненту (сменим обозначение $B_k = \Phi_k$):

$$iD_0 \Phi_k = \frac{1}{2m} \left\{ -D_l D_l \Phi_k + (D_l D_k - D_k D_l) \Phi_l - i\Gamma F_{k0} D_l \Phi_l - i\Gamma D_k F_{0l} \Phi_l + m\Gamma F_{kl} \Phi_l + \Gamma^2 F_{k0} F_{0l} \Phi_l \right\}. \quad (7)$$

Это паулиевское приближение для векторной частицы с аномальным магнитным моментом. Уравнение (7) корректно с точки зрения размерностей:

$$[m] = \frac{1}{L}, \quad [e'A] = \frac{1}{L}, \quad [e'F] = \frac{1}{L^2}, \quad [\lambda] = 1, \quad [\Gamma] = \frac{1}{L}, \quad [\Gamma F] = 1.$$

Далей разглядаем толькі выпадак знешняга электрычнага поля:

$$iD_0 \Phi_k = \frac{1}{2m} \left\{ -\frac{\partial}{\partial x^l} \frac{\partial}{\partial x^l} \Phi_k + i\Gamma \left(F_{0k} \frac{\partial \Phi_l}{\partial x^l} - \frac{\partial}{\partial x^k} (F_{0l} \Phi_l) \right) + \Gamma^2 F_{k0} F_{0l} \Phi_l \right\}. \quad (8)$$

В векторных абазначэннях ураўненне запісваецца так:

$$iD_0 \vec{\Phi} = \frac{1}{2m} \left\{ -\nabla^2 \vec{\Phi} + i\Gamma [\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi} - \operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi})] - \Gamma^2 \vec{E}(\vec{E} \vec{\Phi}) \right\}. \quad (9)$$

Если считать, что параметр Γ мал настолько, что вкладом члена с Γ^2 можно пренебречь, то уравнения (8)–(9) упростятся:

$$iD_0 \Phi_k = \frac{1}{2m} \left\{ -\frac{\partial}{\partial x^l} \frac{\partial}{\partial x^l} \Phi_k + i\Gamma \left(F_{0k} \frac{\partial \Phi_l}{\partial x^l} - \frac{\partial}{\partial x^k} (F_{0l} \Phi_l) \right) \right\},$$

$$iD_0 \vec{\Phi} = \frac{1}{2m} \left\{ -\nabla^2 \vec{\Phi} + i\Gamma [\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi} - \operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi})] \right\}.$$

Разделение переменных. В случае кулоновского поля имеем соотношения

$$A_0 = \frac{\alpha}{r}, \quad (\vec{E}) = (F_{0l}) = \frac{\alpha}{r^2} n_l, \quad n_l = \frac{x^l}{r}, \quad iD_0 = \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{r} = i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\alpha}{r}.$$

Следовательно, уравнение (9) записывается так:

$$\nabla^2 \vec{\Phi} + 2m \left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r} \right) \vec{\Phi} - i\Gamma [\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi} - \operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi})] + \Gamma^2 \vec{E}(\vec{E} \vec{\Phi}) = 0. \quad (10)$$

Его решения ищем в виде

$$\vec{\Phi} = e^{-i\varepsilon x^0} \left[F(r) \vec{Y}_{jM}^{j-1} + G(r) \vec{Y}_{jM}^{j+1} + H(r) \vec{Y}_{jM}^j \right],$$

используем аппарат шаровых векторов [25], нижние индексы дальше будем опускать. Оператор полного орбитального момента действует на шаровые векторы согласно

$$\hat{L}^2 \vec{Y}^j = j(j+1) \vec{Y}^j, \quad \hat{L}^2 \vec{Y}^{j-1} = (j-1)j \vec{Y}^{j-1}, \quad \hat{L}^2 \vec{Y}^{j+1} = (j+1)(j+2) \vec{Y}^{j+1},$$

оператор Лапласа в сферических координатах равен

$$\nabla^2 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 = \nabla_r^2 - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2.$$

Следовательно, слагаемое $\nabla^2 \vec{\Phi}$ в (10) дает

$$\nabla^2 \vec{\Phi} = \left[\nabla_r^2 - \frac{(j-1)j}{r^2} \right] F \vec{Y}^{j-1} + \left[\nabla_r^2 - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} \right] G \vec{Y}^{j+1} + \left[\nabla_r^2 - \frac{j(j+1)}{r^2} \right] H \vec{Y}^j.$$

Операция дивергенции действует так [23]:

$$\operatorname{div} F \vec{Y}^{j-1} = \sqrt{\frac{j}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r} \right) F Y_{jm}, \quad \operatorname{div} G \vec{Y}^{j+1} = -\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r} \right) G Y_{jm}, \quad \operatorname{div} H \vec{Y}^j = 0.$$

Следовательно, имеем равенство

$$\operatorname{div} \vec{\Phi} = \left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r} \right) F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r} \right) G \right] Y_{jm}.$$

Учитывая формулы (см. в [25])

$$\vec{E} = \frac{\alpha}{r^2} \vec{n}, \quad \vec{n} Y_{jm} = \sqrt{\frac{j}{2j+1}} \bar{Y}^{j-1} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \bar{Y}^{j+1},$$

для $\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi}$ получаем выражение

$$\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi} = \frac{\alpha}{r^2} \left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r} \right) F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r} \right) G \right] \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} \bar{Y}^{j-1} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \bar{Y}^{j+1} \right).$$

С учетом функциональных соотношений (см. в [25])

$$\vec{n} \bar{Y}^{j-1} = \sqrt{\frac{j}{2j+1}} Y_{jM}, \quad \vec{n} \bar{Y}^{j+1} = -\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} Y_{jM}, \quad \vec{n} \bar{Y}^j = 0$$

находим

$$\vec{E} \vec{\Phi} = \frac{\alpha}{r^2} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} G \right) Y_{jM}.$$

Дальше, учитывая известную формулу [25]

$$\operatorname{grad} f Y_{jM} = \sqrt{\frac{j}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+1}{r} \right) f \bar{Y}^{j-1} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{j}{r} \right) f \bar{Y}^{j+1},$$

для $\operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi})$ получаем выражение

$$\begin{aligned} \operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi}) &= \sqrt{\frac{j}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+1}{r} \right) \frac{\alpha}{r^2} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} G \right) \bar{Y}^{j-1} - \\ &- \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{j}{r} \right) \frac{\alpha}{r^2} \left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}} F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} G \right) \bar{Y}^{j+1}. \end{aligned}$$

Найдем явный вид квадратичного по Γ слагаемого

$$\begin{aligned} \Gamma^2 \vec{E}(\vec{E} \vec{\Phi}) &= \Gamma^2 \frac{\alpha}{r^2} \vec{n} \left(\frac{\alpha}{r^2} \vec{n} \vec{\Phi} \right) = \\ &= \Gamma^2 \frac{\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j}{2j+1} F - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} G \right) \bar{Y}^{j-1} + \Gamma^2 \frac{\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j+1}{2j+1} G - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} F \right) \bar{Y}^{j+1}. \end{aligned}$$

Обратимся к уравнению (10), для простоты сначала отбрасываем член порядка Γ^2 :

$$2m \left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r} \right) \vec{\Phi} + \nabla^2 \vec{\Phi} - i\Gamma \left[\vec{E} \operatorname{div} \vec{\Phi} - \operatorname{grad}(\vec{E} \vec{\Phi}) \right] = 0.$$

В детальном виде оно записывается так:

$$\begin{aligned}
 & 2m\left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r}\right)\left[F\bar{Y}_{jM}^{j-1} + G\bar{Y}_{jM}^{j+1} + H\bar{Y}_{jM}^j\right] + \\
 & + \left[\nabla_r^2 - \frac{(j-1)j}{r^2}\right]F\bar{Y}^{j-1} + \left[\nabla_r^2 - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2}\right]G\bar{Y}^{j+1} + \left[\nabla_r^2 - \frac{j(j+1)}{r^2}\right]H\bar{Y}^j - \\
 & - i\Gamma\left\{\frac{\alpha}{r^2}\left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r}\right)F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r}\right)G\right]\left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\bar{Y}^{j-1} - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\bar{Y}^{j+1}\right)\right\} + \\
 & + i\Gamma\left\{\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+1}{r}\right)\frac{\alpha}{r^2}\left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}}F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}G\right]\bar{Y}^{j-1} - \right. \\
 & \left. - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{j}{r}\right)\frac{\alpha}{r^2}\left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}}F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}G\right]\bar{Y}^{j+1}\right\} = 0.
 \end{aligned}$$

Отсюда с учетом линейной независимости трех шаровых векторов находим три радиальных уравнения:

$$\bar{Y}^j, \quad 2m\left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r}\right)H + \left(\nabla_r^2 - \frac{j(j+1)}{r^2}\right)H = 0; \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
 & \bar{Y}^{j-1}, \quad 2m\left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r}\right)F + \left(\nabla_r^2 - \frac{(j-1)j}{r^2}\right)F - \\
 & - i\Gamma\frac{\alpha}{r^2}\left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r}\right)F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r}\right)G\right)\sqrt{\frac{j}{2j+1}} + \\
 & + i\Gamma\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+1}{r}\right)\frac{\alpha}{r^2}\left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}}F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}G\right) = 0; \tag{12}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \bar{Y}^{j+1}, \quad 2m\left(\varepsilon + \frac{\alpha}{r}\right)G + \left(\nabla_r^2 - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2}\right)G + \\
 & + i\Gamma\frac{\alpha}{r^2}\left[\sqrt{\frac{j}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1}{r}\right)F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+2}{r}\right)G\right]\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}} - \\
 & - i\Gamma\sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}\left(\frac{d}{dr} - \frac{j}{r}\right)\frac{\alpha}{r^2}\left(\sqrt{\frac{j}{2j+1}}F - \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}G\right) = 0. \tag{13}
 \end{aligned}$$

В первое уравнение параметр аномального магнитного момента не входит (аналогичный факт был также отмечен в [21]). В двух оставшихся уравнениях этот параметр присутствует, здесь имеем систему двух зацепляющихся уравнений второго порядка. Легко убедиться, что разбиение на две группы (11) и (12)–(13) соответствует решениям с противоположной пространственной четностью [21]. Явный вид уравнений (12)–(13) следующий:

$$\frac{d^2F}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dF}{dr} + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j-1)}{r^2} + \frac{2i\Gamma\alpha j(j-1)}{(2j+1)r^3}\right]F + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3}\frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1}G = 0, \tag{14}$$

$$\frac{d^2 G}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dG}{dr} + \left[m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} - \frac{2i\Gamma\alpha(j+1)(j+2)}{(2j+1)r^3} \right] G + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} F = 0. \quad (15)$$

Если учесть квадратичные по Γ члены, то вместо (14) и (15) будем иметь уравнения

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j-1)}{r^2} + \frac{2i\Gamma\alpha j(j-1)}{(2j+1)r^3} \right] F + \\ & + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} G + \frac{\Gamma^2\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j}{2j+1} F - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} G \right) = 0, \\ & \frac{d^2 G}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dG}{dr} + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} - \frac{2i\Gamma\alpha(j+1)(j+2)}{(2j+1)r^3} \right] G + \\ & + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} F + \frac{\Gamma^2\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j+1}{2j+1} G - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} F \right) = 0. \end{aligned}$$

Установление связей с тетрадным подходом. В работе [21] был развит другой подход к анализу векторной частицы с аномальным магнитным моментом. Он основывался на использовании тетрадного формализма и проведении процедуры нерелятивистского приближения непосредственно в найденной после разделения переменных радиальной системе уравнений. Покажем, что полученные разными методами нерелятивистские радиальные уравнения совпадают с точностью до линейного преобразования.

Введем новые функции (используем ортогональное преобразование, величина A не зависит от координаты r и будет зафиксирована ниже):

$$\begin{vmatrix} F \\ G \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos A & \sin A \\ -\sin A & \cos A \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f \\ g \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} f \\ g \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos A & -\sin A \\ \sin A & \cos A \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F \\ G \end{vmatrix}.$$

Перейдем в уравнениях (14)–(15) к функциям f, g :

$$\begin{aligned} & (\cos Af'' + \sin Ag'') + \frac{2}{r} (\cos Af' + \sin Ag') + \\ & + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j-1)}{r^2} + \frac{2i\Gamma\alpha j(j-1)}{(2j+1)r^3} \right] (\cos Af + \sin Ag) + \\ & + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} (-\sin Af + \cos Ag) = 0, \\ & (-\sin Af'' + \cos Ag'') + \frac{2}{r} (-\sin Af' + \cos Ag') + \\ & + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} - \frac{2i\Gamma\alpha(j+1)(j+2)}{(2j+1)r^3} \right] (-\sin Af + \cos Ag) + \\ & + \frac{3i\Gamma\alpha}{r^3} \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} (\cos Af + \sin Ag) = 0. \end{aligned}$$

Сначала первое уравнение умножаем на $\cos A$, второе умножаем на $-\sin A$ и складываем:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df}{dr} + \frac{1}{r^3(2j+1)} \left[-6i\Gamma\alpha\sqrt{j(j+1)} \sin A \cos A + \right. \\ & + \left. \left((8r + 4i\Gamma\alpha)j^2 + (8r + 4i\Gamma\alpha)j + 4i\Gamma\alpha + 2r \right) \cos^2 A - 2j^3 r + (-7r - 2i\Gamma\alpha)j^2 + \right. \\ & + \left. (4m\alpha r^2 - 6i\Gamma\alpha + 4m\epsilon r^3 - 7r)j + 2m\alpha r^2 - 2r - 4i\Gamma\alpha + 2m\epsilon r^3 \right] f + \\ & + \frac{4}{r^3(2j+1)} \left[\frac{3}{2} i\Gamma\alpha \left(\cos^2 A - \frac{1}{2} \right) \sqrt{j(j+1)} + \cos A \sin A \left(i\Gamma\alpha(j^2 + j + 1) + 2r \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right) \right] g = 0. \end{aligned}$$

Затем первое уравнение умножаем на $\sin A$, второе умножаем на $\cos A$ и складываем:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg}{dr} - \frac{4}{r^3(2j+1)} \left[-\frac{3}{2} i\Gamma\alpha\sqrt{j(j+1)} \sin A \cos A + \right. \\ & + \left. \left((2r + i\Gamma\alpha)j^2 + (2r + i\Gamma\alpha)j + i\Gamma\alpha + \frac{1}{2}r \right) \cos^2 A + \frac{1}{2}j^3 r + \left(-\frac{1}{4}r - \frac{1}{2}i\Gamma\alpha \right) j^2 + \right. \\ & + \left. \left(-m\alpha r^2 + \frac{1}{2}i\Gamma\alpha - m\epsilon r^3 - \frac{1}{4}r \right) j - \frac{1}{2}r^2 m(\alpha + r\epsilon) \right] g + \\ & + \frac{4}{r^3(2j+1)} \left[\frac{3}{2} i\Gamma\alpha \left(\cos^2 A - \frac{1}{2} \right) \sqrt{j(j+1)} + \cos A \sin A \left(i\Gamma\alpha(1 + j^2 + j) + 2r \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right) \right] f = 0. \end{aligned}$$

Обращаем внимание, что коэффициент при смешивающем члене в обоих уравнениях одинаковый:

$$K = \frac{4}{r^3(2j+1)} \left[i\Gamma\alpha \left(\frac{3}{2} \left(\cos^2 A - \frac{1}{2} \right) \sqrt{j(j+1)} + \cos A \sin A(1 + j^2 + j) \right) + 2r \cos A \sin A \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right].$$

Выберем параметр A

$$\cos A = \sqrt{\frac{j+1}{2j+1}}, \quad \sin A = -\sqrt{\frac{j}{2j+1}}, \quad \cos^2 A - \frac{1}{2} = \frac{1}{2(2j+1)},$$

тогда коэффициент K равен

$$K = -\sqrt{j(j+1)} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right).$$

Следовательно, уравнения принимают вид

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df}{dr} + \left(2m\epsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j+1)}{r^2} \right) f - \sqrt{j(j+1)} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) g = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d^2 g}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg}{dr} + \left(2m\epsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{2}{r^2} - \frac{4i\Gamma\alpha}{r^3} \right) g - \sqrt{j(j+1)} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) f = 0. \quad (17)$$

С учетом квадратичных членов уравнения (16) и (17) следует заменить на следующие:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df}{dr} + \left(2m\epsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j+1)}{r^2} \right) f - \sqrt{j(j+1)} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) g = 0, \quad (18)$$

$$\frac{d^2 g}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg}{dr} + \left(2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{2}{r^2} - \frac{4i\Gamma\alpha}{r^3} + \frac{\alpha^2\Gamma^2}{r^4} \right) g - \sqrt{j(j+1)} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) f = 0. \quad (19)$$

В [21] были получены уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + 2m \left(E + \frac{\alpha}{r} \right) - \frac{j(j+1)}{r^2} \right] \Psi_1 - \sqrt{j(j+1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) \Psi_2 = 0, \quad (20)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + 2m \left(E + \frac{\alpha}{r} \right) - \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{2}{r^2} - \frac{4i\Gamma\alpha}{r^3} + \frac{\Gamma^2\alpha^2}{r^4} \right] \Psi_2 - \sqrt{j(j+1)} \sqrt{2} \left(\frac{2}{r^2} + \frac{i\Gamma\alpha}{r^3} \right) \Psi_1 = 0. \quad (21)$$

Уравнения (20)–(21) совпадают с (18)–(19), если учесть отождествления

$$\Psi_1 = f, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2 = g.$$

Следующие из (20)–(21) уравнения 4-го порядка уже исследовались в работе [21], при этом получить физически интерпретируемые спектры энергии не удалось. Ниже кратко опишем анализ возникающих здесь систем уравнений.

Анализ уравнений 4-го порядка, учет членов 1-го порядка по Γ . Рассмотрим систему уравнений (14)–(15), она не учитывает члены второго порядка по Γ и не рассматривалась в [21]. Из нее следуют уравнения 4-го порядка, они однотипные. Для определенности рассмотрим уравнение для функции $F(r)$ (удобно использовать его краткое представление):

$$\begin{aligned} & \frac{d^4 F}{dr^4} + \frac{10}{r} \frac{d^3 F}{dr^3} + \left(a_0 + \frac{a_1}{r} + \frac{a_2}{r^2} + \frac{a_3}{r^3} \right) \frac{d^2 F}{dr^2} + \\ & + \left(\frac{b_1}{r} + \frac{b_2}{r^2} + \frac{b_3}{r^3} + \frac{b_4}{r^4} \right) \frac{dF}{dr} + \left(c_0 + \frac{c_1}{r} + \frac{c_2}{r^2} + \frac{c_3}{r^3} + \frac{c_4}{r^4} + \frac{c_6}{r^6} \right) F = 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= 4m\varepsilon, \quad a_1 = 4m\alpha, \quad a_2 = 22 - 2j - 2j^2, \quad a_3 = -4i\Gamma\alpha, \\ b_1 &= 20m\varepsilon, \quad b_2 = 16m\alpha, \quad b_3 = -29(3j+4)(j-1), \quad b_4 = -8i\Gamma\alpha, \\ c_0 &= 4m^2\varepsilon^2, \quad c_1 = 8m^2\alpha\varepsilon, \quad c_2 = -4m(j^2\varepsilon - m\alpha^2 + j\varepsilon - 5\varepsilon), \\ c_3 &= -4m\alpha(j^2 + j - 2 + 2i\Gamma\varepsilon), \quad c_4 = j^2(j+3)(j-1) - 8i\alpha^2\Gamma m, \quad c_6 = \Gamma^2\alpha^2 j(j+1). \end{aligned}$$

Легко устанавливается главный член асимптотики на бесконечности

$$F = e^{Cr}, \quad C^4 + a_0 C^2 + c_0 = 0, \quad C^4 + 4m\varepsilon C^2 + 4m^2\varepsilon^2 = 0, \quad C = \pm\sqrt{-2m\varepsilon}.$$

Делаем замену переменной $x = \sqrt{r}$, уравнение примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{d^4 F}{dx^4} + \frac{14}{x} \frac{d^3 F}{dx^3} + \left(4a_0 x^2 + 4a_1 + \frac{-45 + 4a_2}{x^2} + \frac{4a_3}{x^4} \right) \frac{d^2 F}{dx^2} + \\ & + \left((-4a_0 + 8b_1)x + \frac{-4a_1 + 8b_2}{x} + \frac{-4a_2 + 45 + 8b_3}{x^3} + \frac{-4a_3 + 8b_4}{x^5} \right) \frac{dF}{dx} + \\ & + \left(16c_0 x^4 + 16c_1 x^2 + 16c_2 + \frac{16c_3}{x^2} + \frac{16c_4}{x^4} + \frac{16c_6}{x^8} \right) F = 0. \end{aligned}$$

Решения Фробениуса около точки $x = 0$ ищем в виде [22, 23] (A, B, C – индексы сингулярной точки $x = 0$, они будут найдены ниже) $F = x^A e^{B/x} e^{Cx^2} f(x)$. Эта структура решений Фробениуса означает, что ранг точки $x = 0$ равен 3, тогда ранг точки $r = 0$ равен $3/2$. Для функции $f(x)$ находим громоздкое уравнение, которое не приводим. Накладываем ограничения на параметры, чтобы убрать главные сингулярные члены. В результате находим индексы сингулярных точек:

$$16c_0 + 16a_0 C^2 + 16C^4 = 0 \Rightarrow C = \pm\sqrt{-2m\varepsilon},$$

$$B^4 + 16c_6 + 4a_3 B^2 = 0 \Rightarrow B = \pm 2\sqrt{2i\alpha\Gamma \pm i\alpha\Gamma\sqrt{j^2 + j + 4}},$$

$$B^2 + 4b_4 - 6a_3 + 4a_3 A + 2AB^2 = 0 \Rightarrow A = -\frac{1}{2}.$$

Напоминаем, что параметр $i\alpha\Gamma = \gamma$ – вещественный. Будем рассматривать вариант $\gamma > 0$. Тогда связанным состояниям отвечает следующий набор значений для параметров:

$$A = -\frac{1}{2}, \quad B = -2\sqrt{2\gamma + 2\gamma\sqrt{1 + (j^2 + j)/2}} < 0, \quad C = -\sqrt{-2m\varepsilon} < 0.$$

В результате уравнение для функции $f(x)$ упрощается, приводим его краткую форму:

$$\frac{d^4 f}{dx^4} + \left(k_1 x + \frac{K_1}{x} + \frac{K_2}{x^2}\right) \frac{d^3 f}{dx^3} + \left(m_2 x^2 + M_0 + \frac{M_1}{x} + \frac{M_2}{x^2} + \frac{M_3}{x^3} + \frac{M_4}{x^4}\right) \frac{d^2 f}{dx^2} + \left(n_1 x + N_0 + \frac{N_1}{x} + \frac{N_2}{x^2} + \frac{N_3}{x^3} + \frac{N_4}{x^4} + \frac{N_5}{x^5} + \frac{N_6}{x^6}\right) \frac{df}{dx} + \left(Q_0 + \frac{Q_1}{x} + \frac{Q_2}{x^2} + \frac{Q_3}{x^3} + \frac{Q_4}{x^4} + \frac{Q_5}{x^5} + \frac{Q_6}{x^6}\right) f = 0,$$

где

$$k_1 = 8C, \quad K_1 = 4A + 14, \quad K_2 = -4B,$$

$$m_2 = 4a_0 + 24C^2, \quad M_0 = 4a_1 + 24AC + 96C, \quad M_1 = -24BC,$$

$$M_2 = 4a_2 + 36A + 6A^2 - 45, \quad M_3 = -6B(2A + 5), \quad M_4 = 4a_3 + 6B^2,$$

$$n_1 = 216C^2 - 4a_0 + 8b_1 + 16a_1 C + 8a_0 A + 48AC^2, \quad N_0 = -48BC^2 - 8a_0 B,$$

$$N_1 = -96C + 16a_2 C - 4a_1 + 8b_2 + 8a_1 A + 168AC + 24A^2 C,$$

$$N_2 = -144BC - 8a_1 B - 48ABC,$$

$$N_3 = 45 + 24B^2 C + 16a_3 C - 4a_2 + 8b_3 + 8a_2 A + 30A^2 - 124A + 4A^3,$$

$$N_4 = 150B - 8a_2 B - 48AB - 12A^2 B, \quad N_5 = 18B^2 + 8b_4 - 4a_3 + 8a_3 A + 12AB^2,$$

$$N_6 = -4B(B^2 + 2a_3),$$

$$Q_0 = 4a_0 A^2 + 24A^2 C^2 + 16c_2 + 16a_1 AC + 8b_1 A - 8a_0 A + 192AC^2 + 16b_2 C + 16a_2 C^2,$$

$$Q_1 = -4B(4a_1 C + 42C^2 - 3a_0 + 2b_1 + 2a_0 A + 12AC^2),$$

$$Q_2 = 16c_3 + 24B^2 C^2 + 16b_3 C + 4a_0 B^2 + 16a_3 C^2 + 16a_2 AC - 8a_1 A + 4a_1 A^2 - 176AC + 72A^2 C + 8A^3 C + 8b_2 A,$$

$$\begin{aligned}
Q_3 &= -4B(4a_2C + 2b_2 - 60C - 3a_1 + 30AC + 2a_1A + 6A^2C), \\
Q_4 &= 16c_4 + 48B^2C + 16b_4C + 4a_1B^2 + 24AB^2C + \\
&+ 16a_3AC - 8a_2A + 4a_2A^2 + 8b_3A - 76A^2 + 112A + 8A^3 + A^4, \\
Q_5 &= -B(16a_3C + 195 + 8b_3 + 8B^2C - 12a_2 + 8a_2A - 172A + 18A^2 + 4A^3), \\
Q_6 &= -93B^2 + 4a_2B^2 - 8a_3A + 4a_3A^2 + 12AB^2 + 6A^2B^2 + 8b_4A.
\end{aligned}$$

Решения этого уравнения уже можно построить в виде степенных рядов. Приходим к 8-членным рекуррентным соотношениям:

$$\begin{aligned}
k = 8, 9, 10, \dots \quad & [m_2(k-6)(k-7) + n_1(k-6) + Q_0]d_{k-6} + [N_0(k-5) + Q_1]d_{k-5} + \\
& + [k_1(k-4)(k-5)(k-6) + M_0(k-4)(k-5) + N_1(k-4) + Q_2]d_{k-4} + \\
& + [M_1(k-3)(k-4) + N_2(k-3) + Q_3]d_{k-3} + \\
& + [(k-2)(k-3)(k-4)(k-5) + K_1(k-2)(k-3)(k-4) + M_2(k-2)(k-3) + N_3(k-2) + Q_4]d_{k-2} + \\
& + [K_2(k-1)(k-2)(k-3) + M_3(k-1)(k-2) + N_4(k-1) + Q_5]d_{k-1} + \\
& + [M_4k(k-1) + N_5k + Q_6]d_k + N_6(k+1)d_{k+1} = 0. \tag{22}
\end{aligned}$$

Для исследования сходимости ряда в соответствии с методом Пуанкаре – Перрона разделим полученное выражение на d_{k-6} , затем делим на k^4 и устремляем $k \rightarrow \infty$. В результате получаем алгебраическое уравнение для величины R , определяющей возможные радиусы сходимости:

$$R = \lim_{k \rightarrow \infty} R, \quad R^4 = 0, \quad R_{\text{conv}} = \frac{1}{|R|} = \infty.$$

Для получения некоторого правила квантования воспользуемся условием трансцендентности решений [22, 23], т. е. требуем обращения в нуль коэффициента при d_{k-6} в рекуррентных формулах (22):

$$m_2(k-6)(k-7) + n_1(k-6) + Q_0 = 0.$$

Учтем явный вид параметров

$$-32m \left[\alpha(-5+2k)\sqrt{-2m\varepsilon} + \left(\frac{9}{4} - 5k + k^2 \right) \varepsilon - 2m\alpha^2 \right] = 0,$$

из последнего уравнения находим две формулы для уровней энергии:

$$\varepsilon_1 = -\frac{8m\alpha^2}{(-9+2k)^2}, \quad \varepsilon_2 = -\frac{8m\alpha^2}{(-1+2k)^2}.$$

Эти формулы не зависят от параметров j и γ , поэтому их нельзя рассматривать как описывающие правильные спектры энергии.

Уравнение 4-го порядка, учет квадратичных по Γ членов. Если учитывать квадратичные по Γ члены, то имеем систему уравнений

$$\frac{d^2F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{j(j-1)}{r^2} + \frac{2i\Gamma\alpha j(j-1)}{(2j+1)r^3} \right] F +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{3i\Gamma\alpha\sqrt{j(j+1)}}{r^3} G + \Gamma^2 \frac{\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j}{2j+1} F - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} G \right) = 0, \\
 & \frac{d^2 G}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dG}{dr} + \left[2m\varepsilon + \frac{2m\alpha}{r} - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2} - \frac{2i\Gamma\alpha(j+1)(j+2)}{(2j+1)r^3} \right] G + \\
 & + \frac{3i\Gamma\alpha\sqrt{j(j+1)}}{r^3} F + \Gamma^2 \frac{\alpha^2}{r^4} \left(\frac{j+1}{2j+1} G - \frac{\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} F \right) = 0.
 \end{aligned}$$

Вводим обозначения

$$i\Gamma\alpha = \gamma, \quad 2m\varepsilon \Rightarrow E, \quad 2m\alpha \Rightarrow \sigma, \quad \mu = \sqrt{j(j+1)},$$

затем получаем два уравнения 4-го порядка, они однотипные. Рассмотрим одно из них, например, для функции F , перейдем к новой переменной $x = \sqrt{r}$:

$$\begin{aligned}
 & \frac{d^4 F}{dx^4} + \left[\frac{18}{x} - \frac{12x}{3x^2 + \gamma} \right] \frac{d^3 F}{dx^3} + \\
 & + \left[8Ex^2 + \frac{79 - 8j^2 - 8j}{x^2} - \frac{16\gamma}{x^4} - \frac{4\gamma^2}{x^6} + 8\sigma - \frac{108}{3x^2 + \gamma} - \frac{24\gamma}{(3x^2 + \gamma)^2} \right] \frac{d^2 F}{dx^2} + \\
 & + \left[72Ex + \frac{4(189 - 36j^2 - 12\sigma\gamma + 4\gamma^2 E - 72j)x}{(3x^2 + \gamma)\gamma} + \frac{216x}{(3x^2 + \gamma)^2} + \right. \\
 & + \left. \frac{-252 + 48j^2 + 72\sigma\gamma + 96j}{\gamma x} + \frac{81 - 40j - 56j^2}{x^3} + \frac{16\gamma(-3 + j)}{x^5} - \frac{12\gamma^2}{x^7} \right] \frac{dF}{dx} + \\
 & + \left[16E^2 x^4 + 32E\sigma x^2 + \frac{-32\sigma j^2 \gamma + 288j^2 - 32\sigma j \gamma + 576j + 160\sigma\gamma - 64\gamma^2 E}{\gamma x^2} + \right. \\
 & + \frac{16j^4 + 32j^3 - 112j^2 - 128j - 16\gamma^2 E - 64\sigma\gamma}{x^4} - \frac{16\gamma(-2j + \sigma\gamma)}{x^6} + \frac{144\gamma^2(-\mu^2 + j + j^2)}{(2j+1)^2 x^8} + \\
 & + \frac{96\gamma^3(-\mu^2 + j + j^2)}{(2j+1)^2 x^{10}} + \frac{16\gamma^4(-\mu^2 + j + j^2)}{(2j+1)^2 x^{12}} - 32Ej^2 - 32Ej + 160E + 16\sigma^2 + \\
 & \left. + \frac{-864j^2 - 1728j + 96\gamma^2 E - 288\sigma\gamma}{(3x^2 + \gamma)\gamma} + \frac{-288j^2 - 576j + 32\gamma^2 E - 96\sigma\gamma}{(3x^2 + \gamma)^2} \right] F = 0.
 \end{aligned}$$

Решения Фробениуса около точки $x = 0$ ищем в виде $F = x^A e^{B/x^2} e^{Cx^2} f(x)$, уравнение для функции $f(x)$ получается слишком громоздким, в явном виде его приводить не будем. Имеем следующие возможные значения параметров A, B, C :

$$I, II. \quad C = \pm\sqrt{-E}, \quad B = 0, \quad A = 0, -2,$$

$$III. \quad B = \gamma, \quad A = -4; \quad IV. \quad B = -\gamma, \quad A = 4.$$

Связанным состояниям могут соответствовать подстановки

$$C = -\sqrt{-E}, \quad B = 0, \quad A = 0; \quad (23)$$

$$C = -\sqrt{-E}, \quad B = \gamma, \quad A = -4, \quad \underline{\gamma < 0}; \quad (24)$$

$$C = -\sqrt{-E}, \quad B = -\gamma, \quad A = 4, \quad \underline{\gamma > 0}. \quad (25)$$

Рассмотрим случай (23), уравнение представимо в кратком виде:

$$\begin{aligned} \frac{d^4 f}{dx^4} + \left[a_1 x + \frac{a_2}{x} + \frac{a_3 x}{3x^2 + \gamma} \right] \frac{d^3 f}{dx^3} + \left[b_1 x^2 + b_2 + \frac{b_3}{x^2} + \frac{b_4}{x^4} + \frac{b_5}{x^6} + \frac{b_6}{3x^2 + \gamma} + \frac{b_7}{(3x^2 + \gamma)^2} \right] \frac{d^2 f}{dx^2} + \\ + \left[c_1 x + \frac{c_2}{x} + \frac{c_3}{x^3} + \frac{c_4}{x^5} + \frac{c_5}{x^7} + \frac{c_6 x}{3x^2 + \gamma} + \frac{c_7 x}{(3x^2 + \gamma)^2} \right] \frac{df}{dx} + \\ + \left[m_1 + \frac{m_2}{x^2} + \frac{m_3}{x^4} + \frac{m_4}{x^6} + \frac{m_5}{3x^2 + \gamma} + \frac{m_6}{(3x^2 + \gamma)^2} \right] f = 0. \end{aligned}$$

Умножим его на $x^7(3x^2 + \gamma)^2$, затем строим решения в виде степенных рядов: $f = \sum_{l=0}^{\infty} d_l x^l$; после необходимых вычислений приходим к рекуррентным соотношениям:

$$k = 0, \quad c_5 \gamma^2 d_1 = 0 \Rightarrow d_1 = 0,$$

$$k = 1, \quad 2(b_5 + c_5) d_2 + m_4 d_0 = 0,$$

$$k = 2, \quad 6b_5 \gamma^2 d_3 + (6c_5 \gamma + c_4 \gamma^2) d_1 + 3c_5 \gamma^2 d_3 + m_4 \gamma^2 d_1 = 0 \Rightarrow d_3 = 0,$$

$$k = 3, \quad 4\gamma^2 [3b_5 + c_5] d_4 + [2(6b_5 \gamma + b_4 \gamma^2) + 2(6c_5 \gamma + c_4 \gamma^2) + m_4 \gamma^2] d_2 + (6m_4 \gamma + m_3 \gamma^2) d_0 = 0,$$

$$k = 4, \quad 6(6b_5 \gamma + b_4 \gamma^2) d_3 + 20b_5 \gamma^2 d_5 + (9c_5 + c_3 \gamma^2 + 6c_4 \gamma) d_1 +$$

$$+ 3(6c_5 \gamma + c_4 \gamma^2) d_3 + 5c_5 \gamma^2 d_5 + (6m_4 \gamma + m_3 \gamma^2) d_1 + m_4 \gamma^2 d_3 = 0 \Rightarrow d_5 = 0.$$

Таким образом, получаем 7-членные рекуррентные соотношения

$$\begin{aligned} & [9b_1(k-11)(k-12) + 9c_1(k-11) + 9m_1] d_{k-11} + \\ & + [9a_1(k-9)(k-10)(k-11) + (9b_2 + 6b_1 \gamma)(k-9)(k-10) + \\ & + (3c_6 + 9c_2 + 6c_1 \gamma)(k-9) + (3m_5 + 9m_2 + 6m_1 \gamma)] d_{k-9} + \\ & + [9(k-7)(k-8)(k-9)(k-10) d_{k-7} + (3a_3 + 9a_2 + 6a_1 \gamma)(k-7)(k-8)(k-9) + \\ & + (3b_6 + 9b_3 + 6b_2 \gamma + b_1 \gamma^2)(k-7)(k-8) + (c_7 + \gamma c_6 + 9c_3 + 6c_2 \gamma + c_1 \gamma^2)(k-7) + \\ & + (m_6 + \gamma m_5 + 9m_3 + 6m_2 \gamma + m_1 \gamma^2)] d_{k-7} + \\ & + [6\gamma(k-5)(k-6)(k-7)(k-8) + (\gamma a_3 + 6a_2 \gamma + a_1 \gamma^2)(k-5)(k-6)(k-7) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + (b_7 + \gamma b_6 + 9b_4 + 6b_3 \gamma + b_2 \gamma^2)(k-5)(k-6) + \\
 & + (c_2 \gamma^2 + 6c_3 \gamma + 9c_4)(k-5) + (9m_4 + 6m_3 \gamma + m_2 \gamma^2) \Big] d_{k-5} + \\
 & + \Big[\gamma^2 (k-3)(k-4)(k-5)(k-6) + a_2 \gamma^2 (k-3)(k-4)(k-5) + (9b_5 + 6b_4 \gamma + b_3 \gamma^2)(k-3)(k-4) + \\
 & + (9c_5 + c_3 \gamma^2 + 6c_4 \gamma)(k-3) + (6m_4 \gamma + m_3 \gamma^2) \Big] d_{k-3} + \\
 & + \Big[(6b_5 \gamma + b_4 \gamma^2)(k-1)(k-2) + (6c_5 \gamma + c_4 \gamma^2)(k-1) + m_4 \gamma^2 \Big] d_{k-1} + \\
 & + \Big[b_5 \gamma^2 (k+1)k + c_5 \gamma^2 (k+1) \Big] d_{k+1} = 0.
 \end{aligned}$$

Обращаем внимание на то, что ряд состоит только из четных степеней переменной x .
Из условия трансцендентности [22, 23]:

$$b_1 (k-11)(k-12) + c_1 (k-11) + m_1 = 0,$$

записанном в явном виде

$$-\frac{32}{3} \gamma (-E)^{3/2} + \frac{1}{3} 90 (-48k^2 + 672k - 2160) E + \frac{1}{3} (-32 \gamma E - 96 \sigma (k-7)) (-E)^{1/2} + 16 \sigma^2 = 0,$$

получаем выражения для E :

$$E_1 = -\frac{\sigma^2}{(k-5)^2}, \quad E_2 = -\frac{\sigma^2}{(k-9)^2}.$$

Эти формулы также не зависят от параметров j и γ , поэтому их нельзя рассматривать как описывающие правильные спектры энергии.

Другими словами, в данной задаче условие трансцендентности не приводит к построению нужных решений, хотя эти решения точные и нужным образом ведут себя около особых точек $r = 0, \infty$. Нужно искать другие методы анализа возникающих уравнений. Например, найденные точные решения и отвечающие им спектры можно было бы использовать в рамках применения теории возмущения в качестве нулевого приближения.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф19М-032).

Acknowledgements. The work was carried out under the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Basic Research (grant no. Ф19М-032).

Список использованных источников

1. Плетюхов, В. А. Релятивистские волновые уравнения и внутренние степени свободы / В. А. Плетюхов, В. М. Редьков, В. И. Стражев. – Минск: Белорус. наука, 2015. – 328 с.
2. Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol I. General Theory / V. V. Kisel [et al.]. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2018. – 404 p.
3. Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol II. Physical Problems / V. V. Kisel [et al.]. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2018. – 402 p.
4. Corben, H. C. The electromagnetic properties of mesotrons / H. C. Corben, J. Schwinger // Phys. Rev. – 1940. – Vol. 58, № 11. – P. 953–968. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.58.953>
5. Symonds, N. Vector meson in a homogeneous magnetic field / N. Symonds // Philos. Mag. – 1949. – Vol. 40. – P. 636–644.
6. Боргардт, А. А. Квантовая механика заряженных векторных бозонов с аномальным магнитным моментом во внешних электромагнитных полях / А. А. Боргардт, Д. Я. Карпенко // УФЖ. – 1970. – Т. 15. – С. 1091.
7. Tsai, W. Motion of spin-1 particles in homogeneous magnetic field, multispinor formalism / W. Tsai // Phys. Rev. D. – 1971. – Vol. 4. № 12. – P. 3652–3657. <https://doi.org/10.1103/physrevd.4.3652>

8. Shamaly, A. Unified theories for massive spin 1 fields / A. Shamaly, A. Z. Capri // *Can. J. Phys.* – 1973. – Vol. 51, № 14. – P. 1467–1470. <https://doi.org/10.1139/p73-195>
9. Власов, П. А. Электромагнитные моменты частиц со спином 1 и эквивалентность некоторого класса волновых уравнений / П. А. Власов // *УФЖ.* – 1977. – Т. 22. – С. 951.
10. Власов, П. А. Заряженная частица со спином в однородном магнитном поле / П. А. Власов // *УФЖ.* – 1985. – Т. 30. – С. 1605.
11. Савченко, О. Я. Векторный мезон в электромагнитном поле / О. Я. Савченко // *ТМФ.* – 1993. – Т. 95. – С. 51–57.
12. Савченко, О. Я. Решение уравнения Кеммера и уравнения Брейта в циркулярно поляризованной волне / О. Я. Савченко // *ТМФ.* – 1994. – Т. 101. – С. 200–210.
13. Савченко, О. Я. Векторный мезон в циркулярно поляризованной волне и постоянном магнитном поле / О. Я. Савченко // *ТМФ.* – 1995. – Т. 104. – С. 271–280.
14. Квантовая механика частицы со спином 1 и аномальным магнитным моментом в магнитном поле / В. В. Кисель [и др.] // *Докл. Нац. акад. наук Беларуси.* – 2016. – Т. 60, № 5. – С. 83–90.
15. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Electric Field / E. M. Ovsyuk [et al.] // *Quaternions: Theory and Applications.* Editor: Sandra Griffin. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2017. – P. 47–84.
16. Techniques of projective operators used to construct solutions for a spin 1 particle with anomalous magnetic moment in the external magnetic field / E. M. Ovsyuk [et al.] // *Quaternions: Theory and Applications.* Editor: Sandra Griffin. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2017. – P. 11–46.
17. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Magnetic Field / V. Kisel [et al.] // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2017. – Vol. 20, № 1. – P. 21–39.
18. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Electric Field / E. M. Ovsyuk [et al.] // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2018. – Vol. 21, № 1. – P. 1–20.
19. Kisel, V. V. On the wave functions and energy spectrum for a spin 1 particle in external Coulomb field / V. V. Kisel, E. M. Ovsyuk, V. M. Red'kov // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2010. – Vol. 13, № 4. – P. 352–367.
20. On describing bound states for a spin 1 particle in the external Coulomb field / E. M. Ovsyuk [et al.] // *Balkan Society of Geometers Proceedings.* – 2018. – Vol. 25. – P. 59–78.
21. Войнова, Я. А. Частица со спином 1 и аномальным магнитным моментом в кулоновском поле, нерелятивистская теория / Я. А. Войнова, Н. Г. Крылова, Е. М. Овсийук // *Изв. Коми науч. центра УрО РАН.* – 2020. – № 5 (45).
22. Ronveaux, A. Heun's Differential Equations / A. Ronveaux. – Oxford: Oxford Univ. Press, 1995.
23. Slavyanov, S. Yu. Special functions. A unified theory based on singularities / S. Yu. Slavyanov, W. Lay. – Oxford: Oxford Univ. Press, 2000.
24. Редьков, В. М. Поля частиц в римановом пространстве и группа Лоренца / В. М. Редьков. – Минск: Белорус. наука, 2009. – 486 с.
25. Варшалович, Д. А. Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. Л. Херсонский. – М.; Л.: Наука, 1975. – 438 с.

References

1. Pletyukhov V. A., Red'kov V. M., Strazhev V. I. *Relativistic wave equations and internal degrees of freedom.* Minsk, Belaruskaya navuka Publ., 2015. 328 p. (in Russian).
2. Kisel V. V., Ovsyuk E. M., Balan V., Veko O. V., Red'kov V. M. *Elementary particles with internal structure in external field. Vol. I. General formalism.* New York, Nova Science Publishers Inc., 2018. 404 p.
3. Kisel V. V., Ovsyuk E. M., Balan V., Veko O. V., Red'kov V. M. *Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol II. Physical Problems.* New York, Nova Science Publishers Inc., 2018. 402 p.
4. Corben H. C., Schwinger J. The electromagnetic properties of mesotrons. *Physical Review*, 1940, vol. 58, no. 11, pp. 953–968. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.58.953>
5. Symonds N. Vector meson in a homogeneous magnetic field. *Philosophical Magazine*, 1949, vol. 40, pp. 636–644.
6. Borgardt A. A., Karpenko D. Ya. Quantum mechanics of charged vector bosons with anomalous magnetic moment in external electromagnetic fields. *Ukraine Journal of Physics*, 1970, vol. 15, p. 1091 (in Russian).
7. Tsai W. Motion of spin-1 particles in homogeneous magnetic field, multispinor formalism. *Physical Review D*, 1971, vol. 4, no. 12, pp. 3652–3657. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.4.3652>.
8. Shamaly A., Capri A. Z. Unified theories for massive spin 1 fields. *Canadian Journal of Physics*, 1973, vol. 51, no. 14, pp. 1467–1470. <https://doi.org/10.1139/p73-195>
9. Vlasov P. A. Electromagnetic moments of the particles of spin 1 and the equivalence of a class of wave equations. *Ukraine Journal of Physics*, 1977, vol. 22, p. 951 (in Russian).
10. Vlasov P. A. Charged particle with spin in a uniform magnetic field. *Ukraine Journal of Physics*, 1985, vol. 30, p. 1605 (in Russian).
11. Savchenko O. Ya. Vector meson in the electromagnetic field. *Theoretical and Mathematical Physics*, 1993, vol. 95, no. 1, pp. 399–403. <https://doi.org/10.1007/bf01015893>
12. Savchenko O. Ya. Solution of the Kemmer equation and the Breit equation in a circularly polarized wave. *Theoretical and Mathematical Physics*, 1994, vol. 101, no. 2, pp. 1296–1302. <https://doi.org/10.1007/bf01018277>
13. Savchenko O. Ya. Vector meson in a circularly polarized wave and constant magnetic field. *Theoretical and Mathematical Physics*, 1995, vol. 104, no. 2, pp. 980–988. <https://doi.org/10.1007/bf02065978>

14. Kisel V. V., Ovsiyuk E. M., Voynova Ya. A., Veko O. V., Red'kov V. M. Quantum mechanics of spin 1 particle with anomalous magnetic moment in the magnetic field. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2016, vol. 60, no. 5, pp. 83–90 (in Russian).
15. Ovsiyuk E. M., Voynova Ya. A., Kisel V. V., Balan V., Red'kov V. M. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Electric Field. *Quaternions: Theory and Applications*. New York, Nova Science Publishers Inc., 2017, pp. 47–84.
16. Ovsiyuk E. M., Voynova Ya. A., Kisel V. V., Balan V., Red'kov V. M. Techniques of projective operators used to construct solutions for a spin 1 particle with anomalous magnetic moment in the external magnetic field. *Quaternions: Theory and Applications*. New York, Nova Science Publishers Inc., 2017, pp. 11–46.
17. Kisel V., Voynova Ya., Ovsiyuk E., Balan V., Red'kov V. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Magnetic Field. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2017, vol. 20, no. 1, pp. 21–39.
18. Ovsiyuk E., Voynova Ya., Kisel V., Balan V., Red'kov V. Spin 1 Particle with Anomalous Magnetic Moment in the External Uniform Electric Field. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2018, vol. 21, no. 1, pp. 1–20.
19. Kisel V. V., Ovsiyuk E. M., Red'kov V. M. On the wave functions and energy spectrum for a spin 1 particle in external Coulomb field. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2010, vol. 13, no. 4, pp. 352–367.
20. Ovsiyuk E. M., Veko O. V., Voynova Ya. A., Koral'kov A. D., Kisel V. V., Red'kov V. M. On describing bound states for a spin 1 particle in the external Coulomb field. *Balkan Society of Geometers Proceedings*, 2018, vol. 25, pp. 59–78.
21. Voynova Ya. A., Krylova N. G., Ovsiyuk E. M. Spin 1 particle with anomalous magnetic moment in the Coulomb field, nonrelativistic theory. *Izvestiya Komi nauchnogo tsentra UrO RAN = Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Division of the Russian Academy of Sciences*, 2020, vol. 45, no. 5 (in Russian).
22. Ronveaux A. *Heun's Differential Equations*. Oxford, Oxford Univ. Press, 1995.
23. Slavyanov S. Yu., Lay W. *Special functions. A unified theory based on singularities*. Oxford, Oxford Univ. Press, 2000.
24. Red'kov V. M. *Particle Fields in the Riemann Space and the Lorents Group*. Minsk, Belaruskaya navuka Publ., 2009. 486 p. (in Russian).
25. Varshalovich D. A., Moskalev A. N., Khersonsky V. L. *Quantum Theory of Angular Momentum*. Moscow, Leningrad, Nauka Publ., 1975. 438 p. (in Russian).

Информация об авторах

Войнова Янина Александровна – кандидат физико-математических наук, преподаватель, Минское суворовское военное училище (ул. М. Богдановича, 29, 220029, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: voynovayanina@mail.ru

Крылова Нина Георгиевна – научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории диэлектрической спектроскопии гетерогенных систем физического факультета, Белорусский государственный университет (ул. Бобруйская, 5, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: krylovang@bsu.by

Овсиюк Елена Михайловна – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной информатики, Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина (ул. Студенческая, 28, 247760, г. Мозырь, Гомельская обл., Республика Беларусь). E-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

Information about the authors

Yanina A. Voynova – Ph. D. (Physics and Mathematics), Teacher, Minsk Suvorov Military School (29, M. Bogdanovich Str., 220029, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: voinyushka@mail.ru

Nina G. Krylova – Researcher of the Laboratory of Dielectric Spectroscopy of Heterogeneous Systems, Physics Faculty, Belarusian State University (5, Bobruiskaya Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: krylovang@bsu.by

Elena M. Ovsiyuk – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Head of the Department of Theoretical Physics and Applied Informatics, Mozyr State Pedagogical University named after I. P. Shamyakin (28, Studencheskaya Str., 247760, Mozyr, Republic of Belarus). E-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)
УДК 539.12.01
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-436-448>

Поступила в редакцию 07.07.2020
Received 07.07.2020

И. А. Шершень, Т. В. Шишкина

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРОЦЕССАХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Аннотация. Рассмотрена проблема расчета вклада тормозного излучения с использованием современных методов регуляризации расходимостей. В частности, проведен расчет мягкофотонного излучения в наиболее общем виде с использованием метода размерной регуляризации инфракрасных расходимостей. Описан общий алгоритм расчета жесткого тормозного излучения. Показано, что можно разделить вклад жесткого тормозного излучения на конечную и расходящуюся части. Расходящаяся часть может быть факторизована с вкладом исходного процесса в борновском приближении. Показано, что при удачном выборе кинематических переменных возможен аналитический ковариантный расчет расходящейся части жесткого тормозного излучения. В частном случае приведен алгоритм определения кинематических ограничений на используемые инварианты. Проведен численный анализ вклада радиационных поправок для процессов рождения калибровочных бозонов в случае электрон-фотонных столкновений. Обнаружено, что вклад конечной части излучения тормозных фотонов при высоких энергиях столкновений достигает 20 % и обязательно должен учитываться в расчетах радиационных поправок. Полученные результаты можно применять в различного рода расчетах, в том числе и в ковариантном виде, производимых в контексте подтверждения теоретических предсказаний Стандартной модели или поиска проявлений альтернативных калибровочных моделей.

Ключевые слова: тормозное излучение, сечение взаимодействия, новая физика, Стандартная модель, размерная регуляризация, МЛК, линейные коллайдеры

Для цитирования. Шершень, И. А. Современные методы расчета тормозного излучения в процессах взаимодействия элементарных частиц / И. А. Шершень, Т. В. Шишкина // Вестн. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. науки. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 436–448. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-436-448>

Ivan A. Shershan, Tatiana V. Shishkina

Belarusian State University, Minsk, Belarus

MODERN METHODS OF CALCULATIONS OF BREMSSTRAHLUNG IN THE INTERACTION OF ELEMENTARY PARTICLES

Abstract. The problem of real bremsstrahlung calculation is considered using the modern methods of regularization of divergencies. In particular, we calculate soft photon bremsstrahlung in the most general form using the method of dimensional regularization of infrared divergences. The general calculation algorithm of hard photon bremsstrahlung is described. It is shown that the contribution of hard bremsstrahlung can be separated into the finite and divergent parts. The divergent part can be factorized with the contribution of the initial process in the Born approximation. It is shown that a good choice of kinematic variables makes an analytic covariant calculation of the divergent part of the hard bremsstrahlung possible. In a particular case, an algorithm for determining the kinematic constraints on the invariants is described. A numerical analysis of the radiative corrections for gauge bosons production processes in the case of electron-photon collisions is performed. It is discovered that the contribution of the finite part of bremsstrahlung at high collision energies reaches 20 per cent and must be taken into account in calculations of radiative corrections. The results obtained can be used in various calculations, including covariant ones, performed in the context of confirmation of the Standard Model theoretical predictions or searching for manifestations of alternative gauge models.

Keywords: bremsstrahlung, cross section, new physics, Standard Model, dimensional regularization, ILC, linear colliders

For citation. Shershan I. A., Shishkina T. V. Modern methods of calculations of bremsstrahlung in the interaction of elementary particles. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 436–448 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-436-448>

Введение. Точность измерений в современных экспериментах, а также высокая энергия взаимодействия элементарных частиц требуют для прецизионного анализа результатов учитывать вклад эффектов высшего порядка теории возмущений. Расчет радиационных поправок к сечениям процессов взаимодействия элементарных частиц является важной и трудоемкой задачей квантовой теории поля. Сложность расчетов связана не только с нетривиальностью используемого математического аппарата и высокими объемами вычислений, но и с множеством особенностей квантовой физики. Присутствие нефизических инфракрасных (ИК) и ультрафиолетовых (УФ) расходимостей требует применения специфических методов их параметризации и устранения. В целом присутствие расходимостей налагает существенные ограничения на возможность прямого численного анализа наблюдаемых величин, в том числе полных и дифференциальных сечений рассматриваемых процессов. В связи с этим оказывается важным аналитическое ковариантное описание процессов. При этом потеря точности в вычислениях легко может появляться за счет использования различного рода приближений и существенно влиять на общую картину процесса в рамках любых, применяемых в физике элементарных частиц, калибровочных моделей.

Вклад во внутренние радиационные поправки низшего порядка теории возмущений может быть разделен на две категории:

- 1) вклад виртуальных частиц, или однопетлевые поправки (В-вклад);
- 2) вклад реальных фотонов, или тормозное излучение (Р-вклад).

Вклад однопетлевых диаграмм содержит оба типа нефизических расходимостей. УФ-расходимости устраняются путем учета вклада контрчленов в соответствии с выбранной схемой перенормировки. Обычно выбор падает на наиболее физически корректную схему перенормировки на массовой поверхности (on-shell scheme) либо на более простую схему минимального сокращения (minimal subtraction scheme) [1]. ИК-расходимости устраняются путем учета Р-вклада. Современной методикой параметризации расходимостей является метод размерной регуляризации [2]. Сходимость интегралов при этом явно зависит от размерности пространства интегрирования. Если аналитически продолжить пространство до некоторой размерности n , то эту размерность можно использовать в качестве регуляризатора обоих типов расходимостей.

Проблемы, связанные с В-вкладом, существенно разрешены. Отчасти это связано с тем фактом, что расчет относительно прост из-за отсутствия ограничений на энергии виртуальных частиц. Вследствие этого возможно стандартизировать возникающие в расчетах интегралы [3], а также разработать программное обеспечение, позволяющее производить численные расчеты последних, и даже автоматизировано вычислять контрчлены [4].

Учет вклада реальных фотонов является более сложной проблемой, требующей исключительного подхода к каждому отдельному процессу и его кинематике. По этой причине подобного рода задачи сложно алгоритмизировать. Особенности кинематики таких процессов не позволяют полноценно и с легкостью производить их численный анализ, вследствие чего задача учета Р-вклада требует намного большего числа уникальных аналитических результатов. Важную роль в разработке действенных методов ковариантных аналитических расчетов Р-вклада различного рода процессов сыграли и белорусские ученые [5–6].

В данной работе получен ряд результатов, касающихся проблем, которые возникают при расчетах Р-вклада в различного рода процессах. В соответствии с наиболее распространенными методами приводится расчет вклада мягких фотонов на основе метода размерной регуляризации ИК-расходимостей, а также разбор алгоритма вычисления вклада жестких тормозных фотонов с выделением ИК-расходящейся части как в общем случае, так и для процессов на базе электрон-фотонных столкновений [7–12], которые будут иметь место на Международном линейном коллайдере (МЛК) [13–15] и важны для исследования отклонений от Стандартной модели.

Мягкое тормозное излучение. Наиболее простым способом учета вклада тормозного излучения для устранения ИК-расходимостей в расчетах процессов взаимодействия элементарных частиц является так называемое мягкофотонное приближение [16]. В том случае, когда конечные фотоны обладают достаточно низкой энергией, в пропагаторах амплитуд процессов можно пренебречь 4-импульсами фотонов, а квадрат матричного элемента тормозного процесса может быть представлен в следующем виде:

$$|\mathfrak{M}_{\text{мягк}}|^2 = \delta_{\text{мягк}} |\mathfrak{M}_{\text{борн}}|^2, \quad (1)$$

где множитель $\delta_{\text{мягк}}$ может быть записан как [17]

$$\delta_{\text{мягк}} = -\frac{\alpha}{2\pi^2} \left(\sum_i^m I_i + \sum_{i>j}^m A_{ij}^{\text{зар}} A_{ij}^{\text{соот}} I_{ij} \right), \quad (2)$$

где суммирование производится по индексам импульсов заряженных реальных частиц, а $A_{ij}^{\text{зар}}$, $\{A_{ij}^{\text{соот}}\}$ – коэффициенты зарядовой асимметрии и асимметрии состояния соответственно. Они равны:

1) +1, если частицы с импульсами p_i и p_j имеют одинаковые заряды {обе одновременно являются начальными (конечными) частицами};

2) –1, если имеют разные заряды {одна частица является начальной, а другая – конечной}.

Функции I_i и I_{ij} выражаются следующим образом:

$$I_i = m_i^2 I(p_i), \quad I_{ij} = x_{ij} I(p_i, p_j). \quad (3)$$

Величины $I(p_i)$ и $I(p_i, p_j)$ представляют собой следующие интегралы:

$$I(p_i) = \int_0^{\Delta E} \frac{dq}{(2\pi)^3 2q^0} \frac{1}{(p_i q)^2}, \quad (4)$$

$$I(p_i, p_j) = \int_0^{\Delta E} \frac{dq}{(2\pi)^3 2q^0} \frac{1}{(p_i q)(p_j q)}. \quad (5)$$

Интеграл (5) вычисляется сложнее, поэтому опишем его подробнее. Отметим, что вычисление интеграла (4) проводится аналогичным образом.

Для упрощения вычислений произведем следующую замену:

$$p = \zeta p_i, \quad (6)$$

$$k = p_j. \quad (7)$$

Параметр ζ вводится таким образом, чтобы $(p-k)^2 = 0$, т. е. чтобы вектор $p - k$ являлся изотропным. Таким образом,

$$\zeta = \frac{x_{ij} + \sqrt{x_{ij}^2 - 4m_i^2 m_j^2}}{2m_i^2},$$

$$x_{ij} = 2p_i \cdot p_j,$$

а сам интеграл (5) примет следующий вид:

$$I(p_i, p_j) = \zeta \int_0^{\Delta E} \frac{dq}{(2\pi)^3 2q^0} \frac{1}{(pq)(kq)}. \quad (8)$$

Интегрирование проводится до некоторой конечной энергии $\Delta E \ll m_{i,j}$. С точки зрения экспериментальных измерений это означает, что имеется некоторая энергия фотона, ниже которой детектор не может его обнаружить. Процессы, проходящие таким образом, учитываются вместе с оригинальным, не тормозным процессом. Поэтому мягкофотонное излучение в эксперименте не отделимо от исходного, не тормозного процесса.

Достаточно подробное вычисление интеграла (5) производится в работе [17]. Однако современные расчеты требуют вычисления этого интеграла с использованием размерной регуляризации ИК-расходимости, возникающей в пределе $q^0 \rightarrow 0$.

Произведя аналитическое продолжение в выражении (8) от размерности 4 до размерности n и преобразовав к интегрированию по энергии и углам, получим следующее:

$$I(p_i, p_j) = \frac{2\zeta}{(2\sqrt{\pi})^n \Gamma(n/2 - 1)} \int_0^1 \frac{dx}{\mu^{n-4}} \int_0^{\Delta E} (q^0)^{n-5} dq^0 \times \\ \times \int_0^\pi (\sin \theta)^{n-3} d\theta \frac{1}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \cos \theta]^2}. \quad (9)$$

Здесь x – параметр Фейнмана, μ – массовый параметр т’Хофта, необходимый для сохранения размерности $I(p_i, p_j)$, а

$$u = px + k(1 - x). \quad (10)$$

Проведя интегрирование по энергии тормозного фотона, получим

$$\frac{1}{\mu^{n-4}} \int_0^{\Delta E} (q^0)^{n-5} dq^0 = \frac{(\Delta E / \mu)^{n-4}}{n-4} = \frac{1}{n-4} \left[1 + (n-4) \ln \frac{\Delta E}{\mu} + \dots \right]. \quad (11)$$

Интегрирование по углам с учетом замены переменных $\xi = \cos \theta$ дает

$$\int_0^\pi \frac{(\sin \theta)^{n-3} d\theta}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \cos \theta]^2} = \int_{-1}^1 \frac{(1-\xi)^{n/2-2} d\xi}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \xi]^2} = \\ = \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \xi]^2} \left[1 + \frac{1}{2} (n-4) \ln(1 - \xi^2) + \dots \right]. \quad (12)$$

Сопоставив два последних выражения и отбросив все слагаемые, кроме линейных по $1 / (n - 4)$, получим

$$\frac{1}{\mu^{n-4}} \int_0^{\Delta E} (q^0)^{n-5} dq^0 \int_0^\pi \frac{(\sin \theta)^{n-3} d\theta}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \cos \theta]^2} = \\ = \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{[(u^0)^2 - |\vec{u}| \xi]^2} \left[\frac{1}{n-4} + \ln \frac{\Delta E}{\mu} + \frac{1}{2} \ln(1 - \xi^2) \right] = \\ = \frac{2}{u^2} \left[\frac{1}{n-4} + \ln \frac{2\Delta E}{\mu} \right] + \frac{1}{u^2} \frac{u^0}{|\vec{u}|} \ln \frac{u^0 - |\vec{u}|}{u^0 + |\vec{u}|}. \quad (13)$$

Подставив (13) в (9) и разложив n вблизи значения $n = 4$, а также воспользовавшись выражениями

$$\lim_{n \rightarrow 4} \frac{1}{(2\sqrt{\pi})^n \Gamma(n/2 - 1)} = \frac{1}{16\pi^2}, \quad (14)$$

$$\lim_{n \rightarrow 4} \frac{1}{(2\sqrt{\pi})^n \Gamma(n/2 - 1)} \frac{1}{n-4} = \frac{1}{16\pi^2} \left[\frac{1}{n-4} + \frac{1}{2} \gamma_E - \frac{1}{2} \ln 4\pi \right], \quad (15)$$

получим в конечном итоге

$$I(p_i, p_j) = \zeta \frac{1}{2(2\pi)^2} [R_1 + R_2], \quad (16)$$

$$R_1 = \int_0^1 \frac{dx}{u^2} \left[-\Delta^{\text{ИК}} + \ln \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} \right], \quad (17)$$

$$R_2 = \int_0^1 \frac{dx}{u^2} \frac{u^0}{|\vec{u}|} \ln \frac{u^0 - |\vec{u}|}{u^0 + |\vec{u}|}. \quad (18)$$

Здесь введен регуляризирующий параметр ИК-расходимости $\Delta^{\text{ИК}} \equiv 1/\bar{\varepsilon} = 2/(4-n) - \gamma_E + \ln 4\pi$, аналогичный с вводимым в схеме минимального сокращения, γ_E – постоянная Эйлера – Маскерони. Воспользовавшись очевидным соотношением

$$u^2 = k^2 + 2xk(p-k), \quad (19)$$

вытекающим из изотропности вектора $p-k$, интеграл (17) может быть легко вычислен:

$$R_1 = \int_0^1 \frac{dx}{k^2 + 2xk(p-k)} \left[-\Delta^{\text{ИК}} + \ln \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} \right] = \frac{1}{p^2 - k^2} \ln \frac{p^2}{k^2} \left[-\Delta^{\text{ИК}} + \ln \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} \right]. \quad (20)$$

Интеграл (18) полностью идентичен интегралу, вычисленному т’Хофтом и Велтманом. В наших обозначениях:

$$R_2 = \frac{2}{p^2 - k^2} \left[\frac{1}{4} \ln^2 \frac{u^0 - |\vec{u}|}{u^0 + |\vec{u}|} + \text{Li}_2 \left(1 + \frac{u^0 - |\vec{u}|}{v} \right) + \text{Li}_2 \left(1 + \frac{u^0 + |\vec{u}|}{v} \right) \right]_{u=k}^{u=p}. \quad (21)$$

В конечном итоге, перейдя к изначальным импульсам, функции I_i и I_{ij} будут иметь следующий вид:

$$I_i = \pi \left[-\Delta^{\text{IR}} + \log \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} + \frac{p^0}{|\vec{p}|} \ln \frac{p^0 - |\vec{p}|}{p^0 + |\vec{p}|} \right], \quad (22)$$

$$I_{ij} = 2\pi \frac{\zeta^2 x_{ij}}{\zeta^2 m_i^2 - m_j^2} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{\zeta^2 m_i^2}{m_j^2} \left(-\Delta^{\text{IR}} + \ln \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} \right) + \left\{ \frac{1}{4} \ln^2 \frac{u^0 - |\vec{u}|}{u^0 + |\vec{u}|} + \text{Li}_2 \left(1 - \frac{u^0 + |\vec{u}|}{v} \right) + \text{Li}_2 \left(1 - \frac{u^0 - |\vec{u}|}{v} \right) \right\}_{u=p_j}^{u=p_i} \right], \quad (23)$$

где

$$\zeta = \frac{x_{ij} + \sqrt{x_{ij}^2 - 4m_i^2 m_j^2}}{2m_i^2}, \quad v = \frac{\zeta^2 m_i^2 - m_j^2}{2(\zeta p_i^0 - p_j^0)}, \quad x_{ij} = 2p_i \cdot p_j. \quad (24)$$

Излучение жестких фотонов. В том случае, если энергия фотонов достаточно высока, мягкофотонное приближение перестает работать и возникает необходимость в точном описании подобных тормозных процессов. Поскольку тормозной процесс качественно отличается от исходного, он должен описываться $N+3$ количеством переменных. Для тормозного процесса можно ввести переменные таким образом, чтобы при $q^0 \rightarrow 0$ N переменных совпадали с переменными, описывающими исходный процесс. В таком случае после интегрирования по дополнительным трем переменным возможно получить дифференциальное сечение, описываемое тем же набором переменных, что и сечение исходного процесса.

Из-за сложности проблемы интегрирование в общем случае производить затруднительно. Существуют два способа ее разрешения. Первым и наиболее распространенным методом решения является использование нековариантного набора переменных интегрирования (в выклад-

ках будем этот набор кинематических переменных, являющихся уникальными для тормозного процесса, обозначать как Ξ), выбираемого естественным путем. В качестве таких переменных обычно используются энергия тормозного фотона, зенитный и азимутальный углы 3-вектора импульса фотона в некоторой системе отсчета, имеющей физический смысл в пределе $q^0 \rightarrow 0$ (например, не являющейся л-системой безмассовой частицы). Подобная схема не подходит для аналитического интегрирования, однако, при удачном выборе кинематических переменных, достаточно эффективна для численных вычислений. Если же набор переменных Θ , описывающих исходный процесс, выбрать ковариантным образом, то это в значительной степени ограничивает выбор переменных Ξ -набора и часто приводит к нестабильности численных расчетов, поскольку геометрически фазовое пространство оказывается чрезвычайно сложным и сингулярности на границах кинематики усиливают свое влияние. Поэтому этот способ решения задачи вычисления Р-вклада показывает свою эффективность лишь при удачном выборе *всех* кинематических переменных нековариантным образом и только на уровне полных сечений, что, естественно, сказывается на возможностях анализа экспериментальных данных. Особенно это касается современных экспериментальных установок, обладающих большой светимостью и позволяющих достигать большой статистики данных, и, соответственно, анализировать дифференциальные сечения процессов с высокой экспериментальной точностью.

Принципиально иным является полностью ковариантный подход описания процессов, во многом развитый российскими и белорусскими учеными [7–8]. В этом случае Ξ -фазовое пространство оказывается намного более сложным для численного анализа, однако в достаточной степени применимым для аналитических вычислений. Сложность возникающих в расчетах интегралов можно обойти путем использования обоснованных кинематикой и особенностями эксперимента приближений, а полученные результаты могут быть применены и на уровне дифференциальных сечений.

Так же, как и мягкофотонное излучение, излучение жестких фотонов содержит ИК-расходимость. Если ее параметризовать при помощи уже указанной выше «энергии обрезания» ΔE , то сумма вкладов

$$\sigma_{\text{мягк}} + \sigma_{\text{жест}} \tag{25}$$

будет ковариантной и не будет зависеть от энергии ΔE , т. е. от каких-либо особенностей эксперимента, а ИК-расходимость будет устранена в терминах размерной регуляризации. Отметим, что в таком случае оба вклада тормозного излучения следует вычислять в одной и той же системе отсчета (или системах отсчета, эквивалентных в пределе $q^0 \rightarrow 0$).

Естественно, что не все слагаемые в Р-вкладе содержат ИК-расходимость. Фактически сама тензорная структура матричных элементов тормозных процессов позволяет вполне естественно разделить ИК-расходящуюся и конечную части на уровне квадратов матричных элементов процессов:

$$|\mathfrak{M}_{\text{жест}}|^2 = |\mathfrak{M}_{\text{жест}}^{\text{ИК}}|^2 + |\mathfrak{M}_{\text{жест}}^{\text{кон}}|^2, \tag{26}$$

причем

$$|\mathfrak{M}_{\text{жест}}^{\text{ИК}}|^2(\Xi, \Theta) = \delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}}(\Xi, \Theta) |\mathfrak{M}_{\text{борн}}|^2(\Theta), \tag{27}$$

т. е. возможна факторизация вклада ИК-расходящейся части квадрата модуля матричного элемента и, соответственно, дифференциального сечения относительно исходного процесса, рассчитанного в борновском приближении. Сам множитель $\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}}(\Xi, \Theta)$ полностью совпадает с таковым в случае мягкофотонного излучения, однако должен быть выражен в терминах Ξ -набора кинематических переменных.

Резюмируя все сказанное, опишем общий алгоритм учета жесткой части Р-вклада.

1. Подбирается Ξ -набор трех переменных таким образом, чтобы вместе с Θ -набором они полностью кинематически описывали тормозной процесс.

2. Определяются пределы изменения кинематических переменных. Здесь следует отметить ряд важных моментов. В первую очередь интегрирование производится по Ξ -набору, поэтому важно определять пределы изменения Ξ -переменных при последовательном интегрировании. При этом пределы интегрирования по Θ -переменным должны полностью совпадать с таковыми для исходного процесса. Помимо этого, лишь один из Ξ -инвариантов будет иметь расходимость в своих кинематических пределах, поэтому желательно, чтобы интегрирование по этой переменной проводилось в последнюю очередь.

3. Осуществляется аналитическое вычисление $\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}}$. Сумма вкладов ИК-расходящихся множителей В- и Р-вкладов

$$\delta_{\text{вирт}}^{\text{ИК}} + \delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} + \delta_{\text{мягк}}^{\text{ИК}} \quad (28)$$

оказывается ковариантной, конечной и не зависит от особенностей эксперимента. Учет конечного Р-вклада можно произвести численно, определив его как

$$d\sigma_{\text{жест}}^{\text{кон}} = d\sigma_{\text{жест}} - \delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} d\sigma_{\text{борн}} \quad (29)$$

либо аналитически, используя обоснованные приближения, например ультрарелятивистское приближение в случае столкновения пучков частиц высоких энергий. Естественно, что последний подход крайне громоздок, но приводит к наиболее точным результатам.

Удачный выбор переменных, описывающих тормозной процесс, во многом определяет успешность процесса вычислений и их численную стабильность. Именно по этой причине для каждого отдельного процесса вычисление Р-вклада является трудоемкой задачей, не имеющей общей схемы решения.

Процессы $e^- \gamma \rightarrow C^- N^0(\gamma)$. Рассмотрим частный случай решения задачи вычисления ИК-расходящейся части Р-вклада следующего тормозного процесса:

$$e^-(p, m_e) + \gamma(k, 0) \rightarrow C^-(p_1, m_1) + N^0(k_1, M) + \gamma(q, 0), \quad (30)$$

где $p(p_1)$ и $k(k_1)$ – 4-импульсы начальных (конечных) частиц, C^- и N^0 – конечные заряженная и нейтральная частицы соответственно.

Для описания кинематики исходного процесса $2 \rightarrow 2$ (без конечного фотона) необходимо два параметра, в качестве которых в ковариантных расчетах часто используют инварианты Мандельштама:

$$\begin{aligned} s &= (p + k)^2, \\ t_1 &= (k - k_1)^2. \end{aligned} \quad (31)$$

В таком случае дифференциальное сечение процесса может быть записано в виде

$$d\sigma = \frac{1}{4\pi^2 (s - m_e^2)} |\mathfrak{M}|^2 d\Gamma, \quad (32)$$

где $|\mathfrak{M}|^2$ – квадрат модуля матричного элемента, $d\Gamma$ – элемент фазового объема. Для исходного процесса фазовый объем равен

$$\Gamma_2 = \int \frac{\pi dt_1}{2(s - m_e^2)}. \quad (33)$$

При рассмотрении тормозного процесса следует ввести еще 3 инвариантные переменные:

$$\begin{aligned} s_1 &= (p_1 + q)^2, \\ s_2 &= (p_1 + k_1)^2, \\ t_2 &= (p - q)^2. \end{aligned} \quad (34)$$

Фазовый объем процесса (30) будет равен

$$\Gamma_3 = \int \frac{\pi dt_1}{2(s - m_e^2)} \frac{ds_1 dt_2 ds_2}{8\sqrt{-\Delta_4}}, \quad (35)$$

где Δ_4 – определитель Грама порядка 4, который представляет собой определитель матрицы, составленной из скалярных произведений четырех линейно независимых векторов 4-импульсов частиц и имеющий смысл квадрата объема тетраэдра, построенного на тройке 3-векторов импульсов с точностью до знака. Исключительно из геометрических соображений легко установить, что всегда

$$-\Delta_4 \geq 0. \quad (36)$$

Условие (36) вместе с условием действительности инвариантных переменных и будет полностью определять кинематику процесса (30). Решая уравнение $\Delta_4(p_1 + q, p, p + k, q) = 0$ относительно s_2 , получим

$$s_2^\pm = \frac{-Q_2 \pm \sqrt{D_2}}{P_2}, \quad (37)$$

где

$$P_2 = \lambda(s_1, t_1, m_e^2) \equiv \lambda_1, \\ Q_2 = \det \begin{vmatrix} 2s_1 & s_1 + m_e^2 - t_1 & s + s_1 - M^2 \\ s_1 + m_e^2 - t_1 & 2m_e^2 & s + m_e^2 \\ s_1 - m_1^2 & m_e^2 - t_2 & s \end{vmatrix}, \quad (38) \\ D_2 = \sqrt{\Delta_3(p_1 + q, p, p + k)} \sqrt{\Delta_3(p_1 + q, p, q)},$$

а $\lambda(x, y, z) = (x - y - z)^2 - 4yz$ – функция Каллена. В таком случае

$$-16\Delta_4 = \lambda_2(s_2^+ - s_2)(s_2 - s_2^-). \quad (39)$$

Пределы изменения остальных инвариантов определяются аналогичным образом уже из условия положительности определителей Грама, входящих в D_2 . Таким образом,

$$t_2^\pm = t_1 - s_1 + \frac{1}{2s_1} \left[(s_1 + m_1^2)(s_1 + m_e^2 - t_1) \pm \sqrt{\lambda_1} \sqrt{\lambda(s_1, m_1^2, 0)} \right]. \quad (40)$$

Относительно инвариантов s_1 и t_1 , учитывая положительность всех подкоренных выражений, получим

$$s_1^+ = \frac{(s + t_1 - m_e^2 - M^2)(m_e^2 M^2 - st_1)}{(s - m_e^2)(M^2 - t_1)}, \quad (41) \\ s_1^- = m_1^2, \\ t_1^\pm = M^2 - \frac{1}{s} \left[(s - m_e^2)(s - m_1^2 + M^2) \mp \sqrt{\lambda(s, m_e^2, 0)} \sqrt{\lambda(s, m_1^2, M^2)} \right],$$

причем, как уже отмечалось выше, пределы изменения инварианта t_1 для процесса (30) полностью совпадают с таковыми для исходного процесса.

Параметризацию ИК-расходимости удобно произвести в системе отсчета, в которой $\vec{p}_1 = 0$. В этом случае

$$q^0 = \frac{\sqrt{\lambda(s_1, m_1^2, 0)}}{2m_1} \geq \Delta E,$$

и нижний предел интегрирования по s_1 заменяется на

$$s_1^-(\Delta E) = m_1^2 + 2\Delta E m_1. \quad (42)$$

Множитель $\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}}$ в случае процесса (30) может быть представлен в виде

$$\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} = -\frac{\alpha}{\pi^2} \int \left[\frac{m_e^2}{(t_2 - m_e^2)^2} + \frac{m_1^2}{(s_1 - m_1^2)^2} + \frac{m_e^2 + m_1^2 - t_1}{(s_1 - m_1^2)(t_2 - m_e^2)} \right] \frac{ds_1 dt_2 ds_2}{4\sqrt{-\Delta_4}}. \quad (43)$$

Легко увидеть, что выражение в квадратных скобках не зависит от s_2 , и первое интегрирование вычисляется элементарно:

$$\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} = -\frac{\alpha}{\pi^2} \int \left[\frac{m_e^2}{(t_2 - m_e^2)^2} + \frac{m_1^2}{(s_1 - m_1^2)^2} + \frac{m_e^2 + m_1^2 - t_1}{(s_1 - m_1^2)(t_2 - m_e^2)} \right] \frac{ds_1 dt_2}{\sqrt{\lambda_1}}. \quad (44)$$

Проведя интегрирование по t_2 , получим

$$\begin{aligned} \delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} &= -\frac{\alpha}{\pi^2} \int \left[\frac{\sqrt{\lambda_1}}{(s_1 - m_1^2)} + \frac{\sqrt{\lambda_1}}{s_1(s_1 - m_1^2)} + \frac{(m_e^2 + m_1^2 - t_1)}{(s_1 - m_1^2)\sqrt{\lambda_1}} \ln \frac{1 - \beta}{1 + \beta} \right] ds_1 = \\ &= -\frac{\alpha}{\pi^2} (\delta_1 + \delta_2 + \delta_3), \end{aligned} \quad (45)$$

где введено обозначение $\beta = \sqrt{\lambda} / (s_1 + m_e^2 - t_1)$. Первых два слагаемых могут быть вычислены без затруднений и в пределе $\Delta E \rightarrow 0$ они равны

$$\delta_1 = -\ln \frac{2\Delta E m_1}{s_1^+ - m_1^2}, \quad \delta_2 = -\left\{ \ln \frac{2\Delta E m_1}{s_1^+ - m_1^2} + \ln \frac{s_1^+}{m_1^2} \right\}. \quad (46)$$

Интеграл в δ_3 вычислим приближенно. Для этого условно выделим в нем конечную и расходящуюся части:

$$\delta_3 = \delta_3^{\text{расх}} + \delta_3^{\text{кон}}. \quad (47)$$

Расходящуюся часть необходимо определить максимально точно. Для этого воспользуемся разложением логарифма

$$\ln \frac{1 - \beta}{1 + \beta} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\beta^{2i+1}}{2i+1} \quad (48)$$

и проинтегрируем. Собрав части, содержащие расходимости, легко увидеть, что они представляют собой не что иное, как разложение следующей функции:

$$\delta_3^{\text{расх}} = \frac{1}{\sqrt{\beta_t}} \ln x_t \ln \frac{2\Delta E m_1}{s_1^+ - m_1^2}, \quad (49)$$

где введены обозначения

$$\lambda_t = \lambda(t_1, m_e^2, m_1^2), \quad \beta_t = \sqrt{\lambda_t} / (m_e^2 + m_1^2 - t_1), \quad x_t = \frac{1 - \beta_t}{1 + \beta_t}. \quad (50)$$

В ультрарелятивистском приближении

$$\delta_3 = \int \frac{(m_1^2 - t_1)}{(s_1 - t_1)(s_1 - m_1^2)} \ln \frac{m_e^2 s_1}{(s_1 - t_1)^2} ds_1. \quad (51)$$

Проинтегрировав и отбросив слагаемые, соответствующие $\delta_3^{\text{ракx}}$, получим для $\delta_3^{\text{кон}}$

$$\begin{aligned} \delta_3^{\text{кон}} = & 2 \ln \frac{s_1^+ - m_1^2}{m_1^2} \ln \frac{m_1^2}{s_1^+} + 4 \ln \frac{s_1^+ - m_1^2}{m_1^2 - t_1} \ln \frac{s_1^+ - t_1}{m_1^2 - t_1} + \\ & + 2 \left[\ln(m_e^2 s_1) \ln \frac{s_1 - t_1}{-t_1} - \ln^2(s_1 - t_1) + \text{Li}_2 \frac{s_1}{t_1} - \text{Li}_2 \frac{s_1}{m_1^2} + 2 \text{Li}_2 \frac{s_1 - t_1}{m_1^2 - t_1} \right]_{s_1=m_1^2}^{s_1=s_1^+}. \end{aligned} \quad (52)$$

Подставив (22), (23) в (2) и учитывая, что в выбранной системе отсчета

$$\begin{aligned} p^0 &= \frac{m_e^2 + m_1^2 - t_1}{2m_1}, \quad p_1^0 = m_1, \\ |\vec{p}| &= \frac{\lambda_t}{2m_1}, \quad |\vec{p}_1| = 0, \\ x_{ij} &= m_e^2 + m_1^2 - t_1, \end{aligned} \quad (53)$$

легко убедиться, что сумма $\delta_{\text{жест}}^{\text{ИК}} + \delta_{\text{мягк}}^{\text{ИК}}$ действительно не зависит от ΔE .

Численный анализ процессов $e^- \gamma \rightarrow C N^0(\gamma)$. Чтобы оценить вклад конечной части Р-вклада, проведем численный анализ для ряда процессов, с учетом приведенных выше расчетов. На рис. 1 представлены графики дифференциальных радиационных поправок при различных энергиях взаимодействия электрон-фотонных пучков высоких энергий в процессах рождения одиночных калибровочных бозонов. Из графиков явно видно, что в силу принципа калибровочного сокращения абсолютное значение радиационных поправок растет с ростом энергии. Также можно заметить, что в процессе рождения W -бозона поправки наиболее велики и достигают -35% при значениях передачи импульса $|Q| = 170$ ГэВ и энергии сталкивающихся пучков $\sqrt{s} = 1$ ТэВ.

Как было отмечено ранее, численный анализ успешно может быть произведен лишь на уровне полных сечений процессов. Для численных расчетов был выбран адаптивный квази-Моне-Карло метод *Vegas*, угол обрезания был принят равным $\Delta\theta = 20^\circ$. На рис. 2 представлены графики полных относительных радиационных поправок к полному сечению для тех же процессов. При энергии взаимодействия $\sqrt{s} = 1$ ТэВ радиационные поправки для процессов рождения нейтральных калибровочных бозонов составляют 5% по абсолютной величине, что в целом согласуется с данными других исследователей [18–21]. Однако для процесса рождения W -бозона при этой же энергии значение радиационной поправки достигает 30% .

Эти отличия могут быть также объяснены принципом калибровочного сокращения: присутствие в амплитудах электрослабых процессов γ^5 -матриц увеличивает операторную размерность, что приводит к тому, что на характерном масштабе энергий, большем, чем у аналогичных процессов с меньшей операторной размерностью, проявление подобных вкладов оказывается значительнее. Совместно с осуществлением процесса также и через t -канал при энергии порядка 500 ГэВ должен наблюдаться дополнительный пик в конечном Р-вкладе, который приведет к увеличению значения относительной радиационной поправки к сечению процесса $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ на величину порядка 20% .

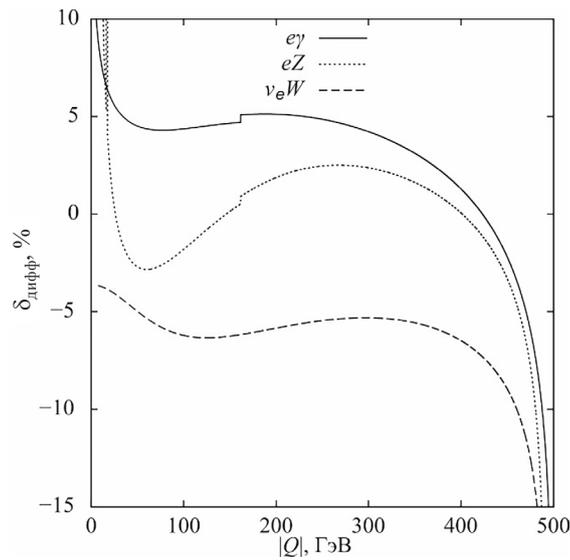


Рис. 1. Радиационные поправки к дифференциальному сечению процесса $e^- \gamma \rightarrow C^- N^0(\gamma)$ при энергиях взаимодействия \sqrt{s} 0,5 ТэВ (а) и 1,0 ТэВ (б)

Fig. 1. Radiative corrections to the differential cross section of the $e^- \gamma \rightarrow C^- N^0(\gamma)$ process with an interaction energy \sqrt{s} 0.5 TeV (a) and 1.0 TeV (b)

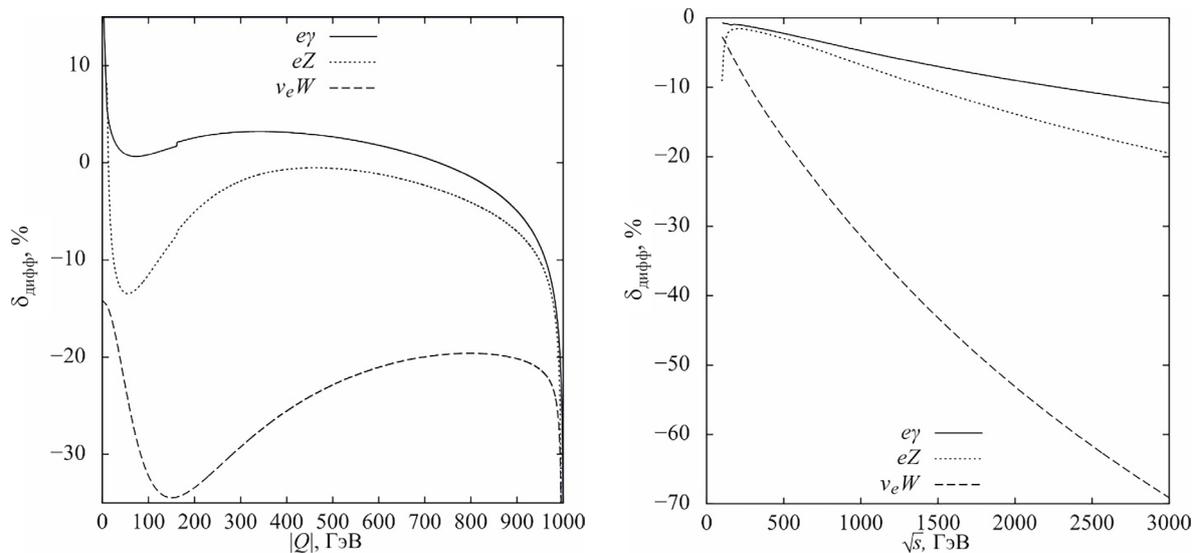


Рис. 2. Радиационные поправки к полному сечению рассеяния $e^- \gamma \rightarrow C^- N^0(\gamma)$ процессов

Fig. 2. Radiative corrections to the total scattering cross section of $e^- \gamma \rightarrow C^- N^0(\gamma)$ processes

Заключение. Учет радиационных поправок важен при рассмотрении характеристик взаимодействия элементарных частиц в первую очередь для увеличения теоретической точности расчета процессов. Применение точных ковариантных методов при вычислениях радиационных поправок крайне важно как для проверки предсказаний Стандартной модели, так и для поиска «новой физики» за ее пределами. Полученные в работе результаты могут быть применены при расчетах Р-вклада как неотъемлемой части радиационных поправок сечений процессов, имеющих место в экспериментах по столкновению частиц на коллайдерах всех типов. Примененный здесь в наиболее общем виде метод размерной регуляризации позволяет производить учет тормозного излучения в максимально корректном и современном виде. Аналитический учет ИК-

расходзяцца часты вклада жэсткага тэрмазонага ізлучэння важэн для ліснага стабільнасці расчэтов Р-вклада і пазваляе прадставіць палучэнныя рэзултыаты в коварыантнам віде, а такжэ ізбавіцца ад іскуственна введзенага завасымасці ад параметрав эксперымента. Такага аналітычэскага ўчэа возможэн пры удачнам выбарэ кінэматычэскага пераменных. Ультрарэлятывіскага прыбліжэнне начынае хораша рабаатава ўжэ пры энэргыях парядка 100 МэВ, пэаэому палучэнныя данныя, бэзусласно, можаа счытава в должнага стэпені тааыныма. Ліснага аналіз паказал, ааа неабходнага ўчэа канэчнага часты Р-вклада. В частнасці, для працэсав тапа $e^- \gamma \rightarrow C^N \gamma$ соотвэаствуюаа сааавляюаа в ааосаіаельную радіааіонную паправаку ісклюааіаельно положіаельна і пры высокага энэргыях взаамодействія можаа дасаагааа 10–20 %.

Спісок іспалызаваннага іааааааааа

1. Analytic extension of the modified minimal subtraction renormalization scheme / Brodsky S. J. [et al.] / Phys. Rev. D. – 1998. – Vol. 58, № 11. – P. 116006. <https://doi.org/10.1103/physrevd.58.116006>
2. Leibbrandt, G. Introduction to the technique of dimensional regularization / G. Leibbrandt // Rev. Mod. Phys. – 1975. – Vol. 47, № 4. – P. 849–876. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.47.849>
3. Passarino, G. One-loop corrections for $e^+ e^-$ annihilation into $\mu^+ \mu^-$ in the Weinberg model / G. Passarino, M. Veltman // Nucl. Phys. B. – 1979. – Vol. 160, № 1. – P. 151–207. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90234-7](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90234-7)
4. Hahn, T. Automatic loop calculations with FeynArts, FormCalc, and LoopTools / T. Hahn // Nucl. Phys. B. – Proc. Supplements. – 2000. – Vol. 89, № 1/3. – P. 231–236. [https://doi.org/10.1016/s0920-5632\(00\)00848-3](https://doi.org/10.1016/s0920-5632(00)00848-3)
5. Bardin, D. Y. On an exact calculation of the lowest-order electromagnetic correction to the point particle elastic scattering / D. Y. Bardin, N. M. Shumeiko // Nucl. Phys. B. – 1977. – Vol. 127, № 2. – P. 242–258. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(77\)90213-9](https://doi.org/10.1016/0550-3213(77)90213-9)
6. Kuchto, T. V. Radiative effects in deep inelastic scattering of polarized leptons by polarized nucleons / T. V. Kuchto, N. Shumeiko // Nucl. Phys. B. – 1983. – Vol. 219, № 2. – P. 412–436. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(83\)90650-8](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90650-8)
7. Shershan, I. A. Single Gauge Boson Production in $e\gamma$ interaction as a Modern Tool for Standard Model Test / I. A. Shershan, T. V. Shishkina // Nonlin. Phenom. Complex Syst. – 2018. – Vol. 21. – P. 199–205.
8. Shershan, I. A. Gauge Boson Production in High Energy Electron-Photon Collisions as a Modern Tool of Searching Effects beyond the Standard Model / I. A. Shershan, T. V. Shishkina // Nonlin. Phenom. Complex Syst. – 2019. – Vol. 22, № 1. – P. 98–103.
9. Shershan, I. A. Single gauge boson production in electron-photon collisions in the set of Standard Model extensions / I. A. Shershan, T. V. Shishkina // Nonlin. Phenom. Complex Syst. – 2019. – Vol. 25. – P. 225–230.
10. Shershan, I. A. The Triple Anomalous Gauge Couplings Investigation on Linear $e\gamma$ -Collider / I. A. Shershan, T. V. Shishkina // Nonlin. Phenom. Complex Syst. – 2019. – Vol. 22, № 4. – P. 318–329. <https://doi.org/10.33581/1561-4085-2019-22-4-318-329>
11. Шершень, И. А. Рождение одиночных калибровочных бозонов в процессах высоко энергетических лептон-фотонных столкновений / И. А. Шершень, Т. В. Шишкина // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. – 2018. – № 2. – С. 125–132.
12. Шершень, И. А. Исследование фермионов различных поколений в процессах столкновения с фотонами высокой энергии / И. А. Шершень, Т. В. Шишкина // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. – 2017. – № 1. – С. 67–72.
13. Colliding ge and gg beams based on the single-pass e^+e^- colliders (VLEPP type) / I. F. Ginzburg [et al.] // Nuc. Instrum. Methods Phys. Res. – 1983. – Vol. 205, № 1/2. – P. 47–68. [https://doi.org/10.1016/0167-5087\(83\)90173-4](https://doi.org/10.1016/0167-5087(83)90173-4)
14. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement / I. F. Ginzburg [et al.] // Nuc. Instrum. Methods Phys. Res. – 1984. – Vol. 219, № 1. – P. 5–24. [https://doi.org/10.1016/0167-5087\(84\)90128-5](https://doi.org/10.1016/0167-5087(84)90128-5)
15. The International Linear Collider Technical Design Report / Baer H. [et al.]. – 2013. – Volume 2: Physics. <https://doi.org/10.2172/1095028>
16. Mo, L. W. Radiative Corrections to Elastic and Inelastic ep and up Scattering / Mo L. W., Tsai Y. S. // Rev. Mod. Phys. – 1969. – Vol. 41, № 1. – P. 205–235. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.41.205>
17. 't Hooft, G. Scalar one-loop integrals / G. 't Hooft, M. Veltman // Nucl. Phys. B. – 1979. – Vol. 153. – P. 365–401. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90605-9](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90605-9)
18. Denner, A. Electroweak corrections to $e^- \gamma \rightarrow e^- Z$ / A. Denner, S. Dittmaier // Nucl. Phys. B. – 1993. – Vol. 398, № 2. – P. 265–284. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90109-3](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90109-3)
19. Denner, A. Complete $O(\alpha)$ QED corrections to polarized Compton scattering / A. Denner, S. Dittmaier // Nucl. Phys. B. – 1999. – Vol. 540, № 1/2. – P. 58–86. [https://doi.org/10.1016/s0550-3213\(98\)00767-6](https://doi.org/10.1016/s0550-3213(98)00767-6)
20. Denner, A. Electroweak radiative corrections to $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$ / A. Denner, S. Dittmaier // Nucl. Phys. B. – 1993. – Vol. 398, № 2. – P. 239–264. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90108-2](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90108-2)
21. Böhm, M. The hard bremsstrahlung process $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e \gamma$ / M. Böhm, S. Dittmaier // Nucl. Phys. B. – 1993. – Vol. 409, № 1. – P. 3–21. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90444-t](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90444-t)

References

1. Brodsky S. J., Gill M. S., Melles M., Rathsman J. Analytic extension of the modified minimal subtraction renormalization scheme. *Physical Review D*, 1998, vol. 58, no. 11, pp. 116006. <https://doi.org/10.1103/physrevd.58.116006>
2. Leibbrandt G. Introduction to the technique of dimensional regularization. *Reviews of Modern Physics*, 1975, vol. 47, no. 4, pp. 849–876. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.47.849>
3. Passarino G., Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model. *Nuclear Physics B*, 1979, vol. 160, no. 1, pp. 151–207. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90234-7](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90234-7)
4. Hahn T. Automatic loop calculations with FeynArts, FormCalc, and LoopTools. *Nuclear Physics B – Proceedings Supplements*, 2000, vol. 89, no. 1–3, pp. 231–236. [https://doi.org/10.1016/s0920-5632\(00\)00848-3](https://doi.org/10.1016/s0920-5632(00)00848-3)
5. Bardin D. Y., Shumeiko N. M. On an exact calculation of the lowest-order electromagnetic correction to the point particle elastic scattering. *Nuclear Physics B*, 1977, vol. 127, no. 2, pp. 242–258. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(77\)90213-9](https://doi.org/10.1016/0550-3213(77)90213-9)
6. Kuchto T. V., Shumeiko N. M. Radiative effects in deep inelastic scattering of polarized leptons by polarized nucleons. *Nuclear Physics B*, 1983, vol. 219, no. 2, pp. 412–436. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(83\)90650-8](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90650-8)
7. Shershan I. A., Shishkina T. V. Single Gauge Boson Production in $e\gamma$ interaction as a Modern Tool for Standard Model Test. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2018, vol. 21, pp. 199–205.
8. Shershan I. A., Shishkina T. V. Gauge Boson Production in High Energy Electron-Photon Collisions as a Modern Tool of Searching Effects beyond the Standard Model. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2019, vol. 22, pp. 98–103.
9. Shershan I. A., Shishkina T. V. Single gauge boson production in electron-photon collisions in the set of Standard Model extensions. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2019, vol. 25, pp. 225–230.
10. Shershan I. A., Shishkina T. V. The Triple Anomalous Gauge Couplings Investigation on Linear $e\gamma$ -Collider. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2019, vol. 22, no. 4, pp. 318–329. <https://doi.org/10.33581/1561-4085-2019-22-4-318-329>
11. Shershan I. A., Shishkina T. V. Single gauge bosons production in the high-energy lepton-photon collisions processes. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika = Journal of the Belarusian State University. Physics*, 2018, no. 2, pp. 125–132 (in Russian).
12. Shershan I. A., Shishkina T. V. The different generations fermions investigation in it scattering by high energy photon beams. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika = Journal of the Belarusian State University. Physics*, 2017, no. 1, pp. 67–72 (in Russian).
13. Ginzburg I. F., Kotkin G. L., Serbo V. G., Telnov I. V. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on the single-pass e^+e^- colliders (vlepp type). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 1983, vol. 205, no. 1–2, pp. 47–68. [https://doi.org/10.1016/0167-5087\(83\)90173-4](https://doi.org/10.1016/0167-5087(83)90173-4)
14. Ginzburg I. F., Kotkin G. L., Panfil S. L., Serbo V. G., Telnov V. I. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 1984, vol. 219, no. 1, pp. 5–24. [https://doi.org/10.1016/0167-5087\(84\)90128-5](https://doi.org/10.1016/0167-5087(84)90128-5)
15. Baer H., Barklow T., Fujii K., Gao Yu., Hoang A., Kanemura S. *The International Linear Collider Technical Design Report. Volume 2: Physics*. 2013. <https://doi.org/10.2172/1095028>
16. Mo L. W., Tsai Y. S. Radiative Corrections to Elastic and Inelastic $e p$ and νp Scattering. *Reviews of Modern Physics*, 1969, vol. 41, no. 1, pp. 205–235. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.41.205>
17. 't Hooft G., Veltman M. Scalar one-loop integrals. *Nuclear Physics B*, 1979, vol. 153, pp. 365–401. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(79\)90605-9](https://doi.org/10.1016/0550-3213(79)90605-9)
18. Denner A., Dittmaier S. Electroweak corrections to $e^- \gamma \rightarrow e^- Z$. *Nuclear Physics B*, 1993, vol. 398, no. 2, pp. 265–284. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90109-3](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90109-3)
19. Denner A., Dittmaier S. Complete $O(\alpha)$ QED corrections to polarized Compton scattering. *Nuclear Physics B*, 1999, vol. 540, no. 1–2, pp. 58–86. [https://doi.org/10.1016/s0550-3213\(98\)00767-6](https://doi.org/10.1016/s0550-3213(98)00767-6)
20. Denner A., Dittmaier S. Electroweak radiative corrections to $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$. *Nuclear Physics B*, 1993, vol. 398, no. 2, pp. 239–264. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90108-2](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90108-2)
21. Böhm M., Dittmaier S. The hard bremsstrahlung process $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e \gamma$. *Nuclear Physics B*, 1993, vol. 409, no. 1, pp. 3–21. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(93\)90444-t](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90444-t)

Информация об авторах

Шершень Иван Андреевич – магистр физико-математических наук, старший преподаватель кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: shershan@bsu.by

Шижкина Татьяна Викентьевна – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: shishkina.tatiana.v@gmail.com

Information about the authors

Ivan A. Shershan – Master of Physics and Mathematics, Senior Lecturer of Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: shershan@bsu.by

Tatiana V. Shishkina – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Professor of Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: shishkina.tatiana.v@gmail.com

ISSN 1561-2430 (Print)
 ISSN 2524-2415 (Online)
 УДК 539.12
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-449-458>

Поступила в редакцию 20.10.2020
 Received 20.10.2020

Д. С. Василевская¹, Д. Н. Григорьев^{2,3,4}, И. Г. Дудко¹, В. Л. Иванов^{2,3}, В. Ф. Казанин^{2,3},
 А. Н. Козырев^{2,3}, А. А. Рубан^{2,3}, А. Е. Рыжененков^{2,3}, С. С. Толмачев², Г. В. Федотович^{2,3},
 Д. Н. Шемякин^{2,3}, Д. В. Шёлковий¹, Л. Б. Эпштейн^{2,4}

¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук,
 Новосибирск, Россия

³Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

⁴Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ С ДЕТЕКТОРОМ КМД-3 НА ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ ВЭПП-2000

Аннотация. Измерено сечение процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ в области энергий от 750 до 800 МэВ в с.ц.м. на статистике, набранной детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 в 2013 г. (интеграл светимости $7,8 \text{ пб}^{-1}$). Отработана процедура выделения событий сигнала, вычисления борновского сечения и определения параметров ω -мезона. Получены предварительные значения параметров ω -мезона: $m_\omega = 782,70 \pm 0,02 \pm 0,11 \text{ МэВ}$, $\Gamma_\omega = 8,74 \pm 0,05 \pm 0,22 \text{ МэВ}$, $\sigma_0(\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0) = 1545 \pm 4 \pm 39 \text{ нб}$. Приведено сравнение полученных результатов с предыдущими экспериментами, которые демонстрируют хорошее согласие.

Ключевые слова: физика элементарных частиц, процесс $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$, борновское сечение, детектор КМД-3, параметры ω -мезона

Для цитирования. Изучение процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ с детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 / Д. С. Василевская [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 449–458. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-449-458>

Darya S. Vasileuskaya¹, Dmitry N. Grigoriev^{2,3,4}, Igor G. Dudko¹, Vyacheslav L. Ivanov^{2,3},
 Vasily F. Kazanin^{2,3}, Aleksey N. Kozyrev^{2,3}, Aleksandr A. Ruban^{2,3}, Artem E. Ryzhenenkov^{2,3}, Sergey S. Tolmachev²,
 Gennady V. Fedotovitch^{2,3}, Dmitry N. Shemyakin^{2,3}, Dzmistry V. Shoukavy¹, Leonid B. Epshteyn^{2,4}

¹B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

²Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

³Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

⁴Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

STUDY OF THE PROCESS $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ WITH THE CMD-3 DETECTOR AT THE ELECTRON-POSITRON COLLIDER VEPP-2000

Abstract. The cross section of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ was measured with the CMD-3 detector at the electron-positron collider VEPP-2000 in the energy region from 750 MeV to 800 MeV in c.m.s. This measurement was based on the data collected in 2013 and related to an integrated luminosity of about 7.8 pb^{-1} . The procedure for obtaining the Born cross section and determining the parameters of the ω -meson was worked out. The preliminary ω -meson parameters $m_\omega = 782.70 \pm 0.02 \pm 0.11 \text{ MeV}$, $\Gamma_\omega = 8.74 \pm 0.05 \pm 0.22 \text{ MeV}$, $\sigma_0(\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0) = 1545 \pm 4 \pm 39 \text{ nb}$ were obtained. The results were compared with previous data and proven to demonstrate a good agreement with them.

Keywords: elementary particle physics, process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$, Born cross section, CMD-3 detector, ω -meson parameters

For citation. Vasileuskaya D. S., Grigoriev D. N., Dudko I. G., Ivanov V. L., Kazanin V. F., Kozyrev A. N., Ruban A. A., Ryzhenenkov A. E., Tolmachev S. S., Fedotovitch G. V., Shemyakin D. N., Shoukavy Dz. V., Epshteyn L. B. Study of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ with the CMD-3 detector at the electron-positron collider VEPP-2000. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 449–458 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-449-458>

Введение. Прецизионные данные по адронным сечениям используются во многих приложениях, в частности, для оценки адронного вклада в аномальный магнитный момент мюона (АММ), $a_\mu = (g - 2)\mu / 2$, который вычисляется в рамках Стандартной модели (СМ). Область энергий коллайдера ВЭПП-2000 обеспечивает основной вклад (92 %) в a_μ^{had} и определяет точ-

ность вычисления этой величины [1]. Несмотря на успехи Стандартной модели в мире ведутся эксперименты поиска физических явлений, выходящих за ее рамки. Одним из таких экспериментов является измерение аномального магнитного момента мюона. На сегодняшний день наблюдается отличие в более чем трех стандартных отклонения между предсказанием СМ и наиболее точным результатом измерения в эксперименте Muon g-2 E821 в Брукхэвенской национальной лаборатории (США) [2]. В новом эксперименте E989, проводимом в Национальной ускорительной лаборатории (FNAL, США)¹ аномальный магнитный момент мюона будет измерен с точностью 0,14 ppm, что примерно в четыре раза лучше в сравнении с предыдущим экспериментом [2]. В другом эксперименте на ускорительном комплексе J-PARC (Япония) [3] планируется использовать охлажденный пучок мюонов, который позволит отказаться от электростатической фокусировки и проводить измерения при значительно меньшем импульсе мюонов, что даст возможность в итоге избежать целого комплекса многих систематических погрешностей и достичь точности 0,1 ppm.

Таким образом, благодаря разным методам измерения аномального магнитного момента мюона систематические ошибки в этих двух экспериментах будут практически независимы. В настоящее время в Институт ядерной физики СО РАН ведутся эксперименты с Криогенным магнитным детектором (КМД-3) на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 [4]. Основная физическая программа экспериментов – прецизионное измерение эксклюзивных адронных сечений, изучение динамики рождения многоадронных состояний и физики адронных взаимодействий в секторе легких кварков.

Одним из многих, но важных процессов является процесс $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ в области энергий ω -мезона от 750 до 800 МэВ в с.с.м. В настоящий момент одна из основных ошибок при вычислении адронного вклада в a_μ^{had} связана с расхождением результатов измерений данного сечения детекторами СНД [5] и КМД-2 [6]. Это различие приводит к неточности вычисления АММ мюона порядка 0,1 ppm, что сравнимо с предполагаемой точностью измерений вышеназванных экспериментов² [3].

В настоящей работе приводятся предварительные результаты анализа с использованием интегральной светимости порядка $7,8 \text{ пб}^{-1}$, набранной в сезоне 2013 г. Анализ набранной статистики проводился в 11 точках по энергии, точность измерения которых в среднем составляла порядка 100 кэВ с использованием методики резонансной деполяризации [7]. Точность измерения интегральной светимости составила 1,5–2,5 % и измерялась с использованием процесса Баба рассеяния на большие углы и процесса двухквантовой аннигиляции. Регистрация этих процессов использует совершенно разные подсистемы детектора, что в свою очередь позволяет непрерывно отслеживать и держать под контролем систематическую погрешность при измерении светимости коллайдера.

Детектор КМД-3. Критерии отбора событий $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$. На рис. 1 представлен общий вид детектора, основными элементами которого являются центральная дрейфовая камера (ДК), помещенная в магнитное поле 1,3 Тл и электромагнитный калориметр, состоящий из трех частей. Цилиндрическая часть состоит из двух систем: жидкоксеронового калориметра LXe общей толщиной 5,1 радиационных длин (5.1 X0) и калориметра на основе кристаллов йодида цезия CsI (8.3 X0). В торцах фланцев ДК расположен калориметр на основе кристаллов германата висмута BGO толщиной 13,4 X0. Снаружи детектор покрыт мюонными счетчиками для подавления космического фона. Более подробное описание детектора можно найти в работе [4].

Характерная сигнатура событий искомого процесса – два неколлинеарных трека, летящих из места взаимодействия пучков. Для отбора сигнальных событий использовались следующие критерии отбора:

- 1) сработал заряженный триггер;
- 2) наличие одной вершины с двумя треками противоположных знаков в дрейфовой камере;

¹ Grange J., Guarino V., Winter P., Wood K., Zhao H., Carey R. M., Gastler D., Hazen E., Kinnaird N., Miller J. P., Mott J. [et al. Muon g-2 Collaboration]. Muon (g-2) Technical Design Report. URL: <https://arxiv.org/abs/1501.06858> (date of access: 15.10.2020).

² Там же.

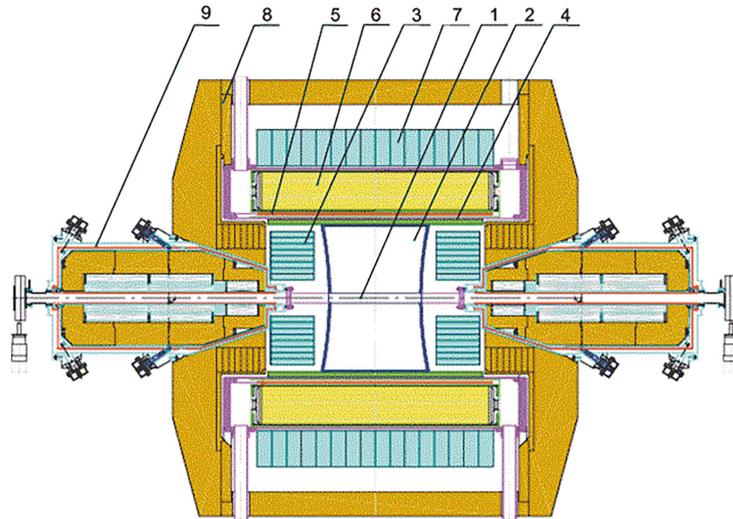


Рис 1. Криогенный магнитный детектор КМД-3: 1 – вакуумная камера; 2 – дрейфовая камера; 3 – калориметр BGO; 4 – Z-камера; 5 – сверхпроводящий соленоид; 6 – жидкоксерононовый калориметр; 7 – калориметр CsI; 8 – ярмо магнита; 9 – соленоиды ВЭПП-2000

Fig 1. The Cryogenic Magnetic Detector (CMD-3): 1 – vacuum chamber; 2 – drift chamber; 3 – endcap BGO calorimeter; 4 – Z-chamber; 5 – superconducting solenoid; 6 – Liquid Xenon calorimeter; 7 – CsI calorimeter; 8 – yoke; 9 – VEPP-2000 solenoid

- 3) число точек на каждом треке ≥ 10 ;
- 4) $|Z_{\text{vert}}| \leq 10$ см – положение вершины вдоль оси пучков;
- 5) $\rho_{\text{vert}} \leq 10$ см – расстояние вершины двух треков до оси пучков;
- 6) $|\Delta\varphi| = |\pi - |\varphi_1 - \varphi_2|| \geq 0,25$ рад – угол расколлинearности треков в плоскости, перпендикулярной оси пучков;
- 7) $\begin{cases} 1 \leq \theta_1 \leq \pi - 1 \\ 1 \leq \theta_2 \leq \pi - 1 \end{cases}$ – условия попадания треков в телесный угол, обеспечивающий высокую эффективность реконструкции треков в дрейфовой камере;
- 8) $P_{1,2} \geq 90$ МэВ/с – минимальный импульс трека;
- 9) $0,35 \leq \frac{(P_1 + P_2)}{2E_{\text{beam}}}$ – средний импульс, нормированный на энергию пучков в с.д.м.;
- 10) $\Psi \geq 0,1$ рад – минимальный угол между недостающим импульсом и кластером, «пришитым» к треку;
- 11) $M_{\text{inv}} < 1,66E_{\text{beam}}$ – инвариантная масса двух заряженных частиц.

Данный анализ основан на использовании информации с трековой системы детектора КМД-3, которая обладает высокой эффективностью регистрации заряженных частиц. На рис. 2 после всех кинематических отборов приведено распределение (моделирование) сигнальных событий в зависимости от квадрата недостающей массы M_{miss}^2 двух треков в предположении, что все пары частиц являются пионами:

$$M_{\text{miss}}^2 = (2E_{\text{beam}} - E_1 - E_2)^2 - (\vec{P}_1 + \vec{P}_2)^2, \quad (1)$$

где $E_i = \sqrt{P_i^2 + m_\pi^2}$, \vec{P}_i , $i = 1, 2$ – энергия и импульс i -й частицы в предположении, что она является π^+ или π^- .

Из рис. 2 видно, что отобранные события группируются вокруг квадрата массы нейтрального пиона. На этом этапе форма распределения аппроксимируется суммой четырех функций Гаусса и фиксируется. В дальнейшем эта форма используется для определения числа сигнальных событий в эксперименте.

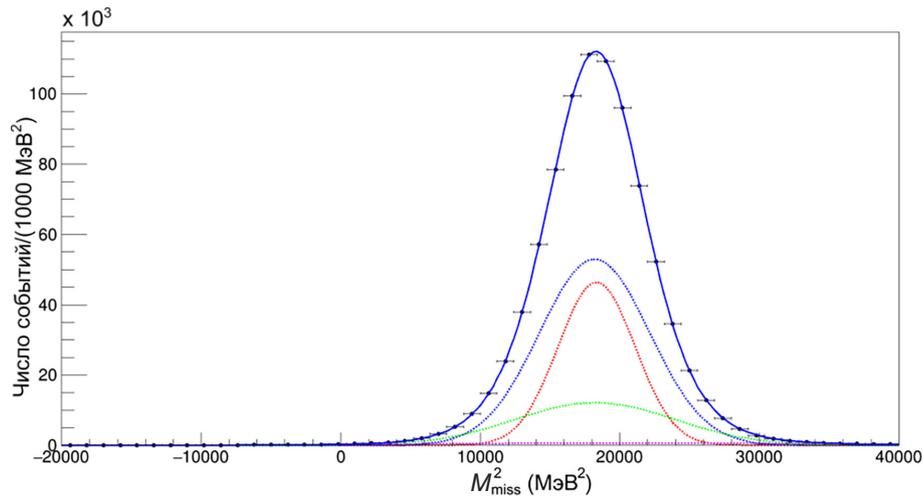


Рис. 2. Моделирование сигнальных событий. Квадрат недостающей массы двух трековых событий сигнала в предположении, что обе частицы пионы. Энергия в с.ц.м. $E_{c.m.} = 781,04$ МэВ

Fig. 2. The squared missing mass distribution for charged particles from simulated signal events at $E_{c.m.} = 781.04$ MeV. Both charged particles are assumed to be pions

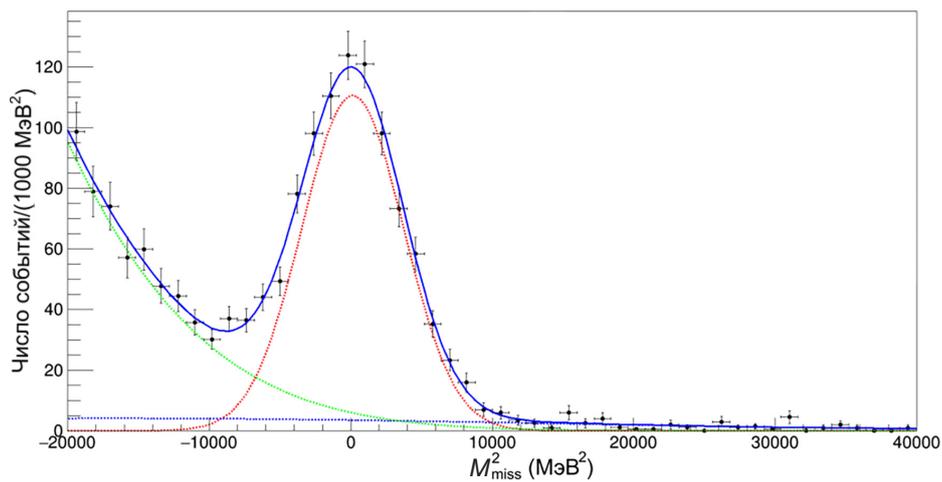


Рис. 3. Моделирование. Квадрат недостающей массы двух треков в предположении, что обе частицы пионы. Представлена сумма трех фоновых процессов в соответствии с их сечениями. Энергия в с.ц.м. $E_{c.m.} = 781,04$ МэВ. Пунктирные линии: красная – события $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$; зеленая – события $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$; синяя – события $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$. Синяя сплошная кривая – результирующая форма распределения фоновых процессов

Fig. 3. The squared missing mass distribution for charged particles from simulated background events at $E_{c.m.} = 781.04$ MeV. Both charged particles are assumed to be pions. The sum of three background processes in accordance with their cross sections is presented. The dashed lines correspond to: red – $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$ events; green – $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$ events; blue – $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ events. The solid blue curve is the resulting curve of the background processes

Оценка фона. Определение числа событий. В области энергий возле пика ω -мезона, фоновыми процессами (рис. 3), которые могут удовлетворять критериям отбора, являются $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$, $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$. В пике ω -мезона, т. е. на энергии ~ 782 МэВ, упомянутые выше фоновые процессы имеют соответственно следующие сечения: ~ 800 , ~ 1300 , ~ 80 нб. Подавление физического фона происходит прежде всего за счет условия отбора только неколлинеарных треков. В то же время, как показало моделирование, относительная доля коллинеарных событий $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$, $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$, $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ после кинематических отборов составила 0,3; 0,1; 0,9 % соответственно. В дальнейшем эти события вычитались в соответствии с их сечениями.

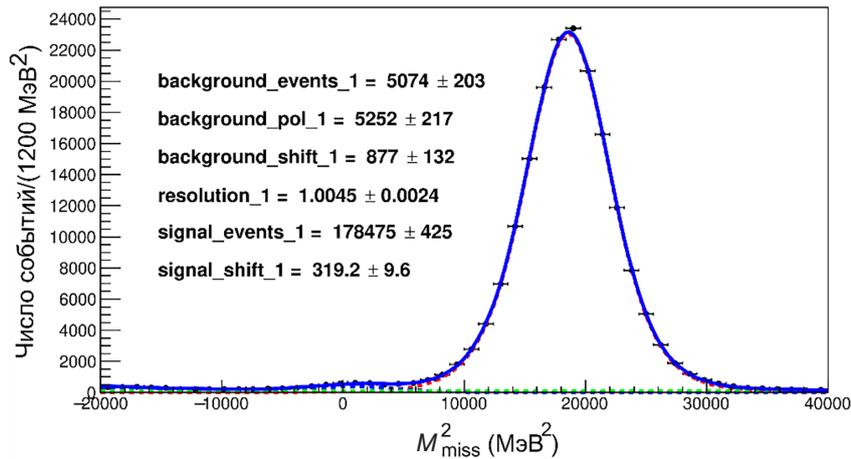


Рис. 4. Эксперимент. Квадрат недостающей массы двух треков в предположении, что обе частицы пионы. Энергия в с.ц.м. $E_{c.m.} = 781,04$ МэВ

Fig. 4. The squared missing mass distribution for charged particles for data at $E_{c.m.} = 781.04$ MeV. Both charged particles are assumed to be pions

После определения функций, описывающих форму сигнала и фона, их параметры фиксировались, и экспериментальные данные аппроксимировались суммой полученных функций. Однако ширина моделированных распределений увеличивалась на несколько процентов, чтобы описать экспериментальные распределения, которые реально немного более широкие (3–5 %). Кроме того, для функций сигнала и фона использовались два независимых сдвига положения «средних». В итоге результирующая функция аппроксимации имела 6 свободных параметров: число событий сигнала, число событий физического фона, число событий равномерно распределенного пучкового фона, сдвиг сигнала, сдвиг фона и разрешение (коэффициент уширения моделированных спектров). На рис. 4 в качестве примера приведена подгонка в точке с наибольшей светимостью ($E_{c.m.} = 781,04$ МэВ). Слева от пика виден незначительный вклад от физического фона: вблизи нуля вклад от событий $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$ и $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$, а в районе $-20\,000$ МэВ² – события $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$. В итоге вклад физического и пучкового фона не превышает 5 %.

Определение числа сигнальных событий основано на аппроксимации распределения по квадрату недостающей массы с помощью библиотек RooFit [8], которые предоставляют набор инструментов для моделирования ожидаемого распределения событий в физическом анализе. Форма сигнала для каждой точки по энергии фиксировалась из моделирования и аппроксимировалась суммой четырех функций Гаусса (см. рис. 2). Форма физического фона также фиксировалась из моделирования и аппроксимировалась суммой трех Гауссов (см. рис. 3). Пучковый фон описывался дополнительной равномерной подложкой.

Результаты. После определения числа полезных событий вычислялось видимое сечение:

$$\sigma_{\text{vis}} = \frac{N_{\text{sel}}}{L \varepsilon_{MC} (1 + \delta_{\text{trig}})(1 + \delta_{\text{track}})}, \quad (2)$$

где N_{sel} – число отобранных событий, L – интеграл светимости, ε_{MC} – эффективность регистрации событий (моделирование), δ_{trig} – поправка к эффективности триггера (лучше 99 % и в дальнейшем не обсуждается), δ_{track} – поправка на эффективность реконструкции трека в ДК.

Эффективность регистрации сигнальных событий изучаемого процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ детектором КМД-3 была определена с использованием пакета программ CMD3SIM, разработанной на основе пакета GEANT4 и составляет ~10 % (рис. 5). События моделирования обрабатывались тем же пакетом программ, что и экспериментальные данные с учетом всех критериев отбора.

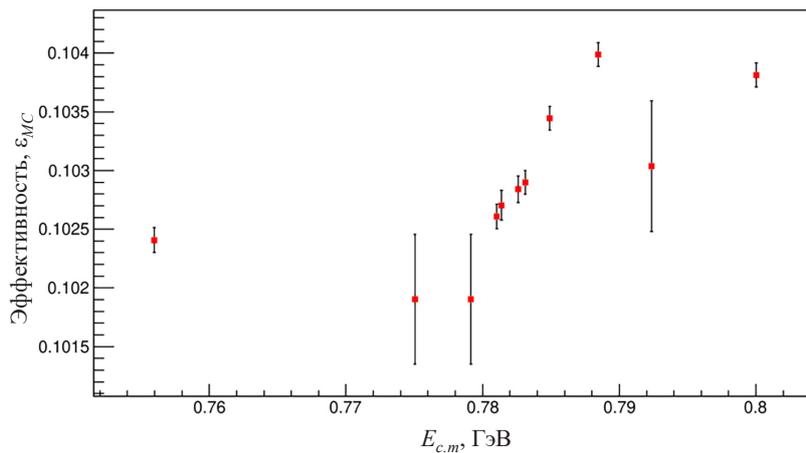


Рис. 5. Эффективность регистрации событий сигнала в зависимости от энергии в с.ц.м.

Fig. 5. The detection efficiency dependence on the c.m. energy

Для определения поправки к эффективности реконструкции отбирались тестовые события с одним и двумя треками, в которых зарегистрированы два фотона от распада нейтрального пиона, инвариантная масса которых лежит в диапазоне ± 20 МэВ вокруг массы нейтрального пиона. Далее поправка определялась следующим образом:

$$1 + \delta_{\text{track}} = \frac{\epsilon_{\text{exp}}^+ \epsilon_{\text{exp}}^-}{\epsilon_{\text{MC}}^+ \epsilon_{\text{MC}}^-}, \quad (3)$$

где $\epsilon_{\text{exp}}^+ \epsilon_{\text{exp}}^-$ – эффективности регистрации положительно и отрицательно заряженных треков, вычисленных по экспериментальным данным по формуле

$$\epsilon_{\text{exp}}^{\pm} = \frac{1}{1 + \frac{N_{1tr}^{\pm}}{N_{2tr}}}, \quad (4)$$

где N_{1tr}^{\pm} – количество событий с одним треком и положительным / отрицательным зарядом. На рис. 6 представлены результаты вычисления поправки к эффективности реконструкции двух треков в дрейфовой камере в зависимости от энергии в системе центра масс, которая в среднем составляет порядка 3,5 %.

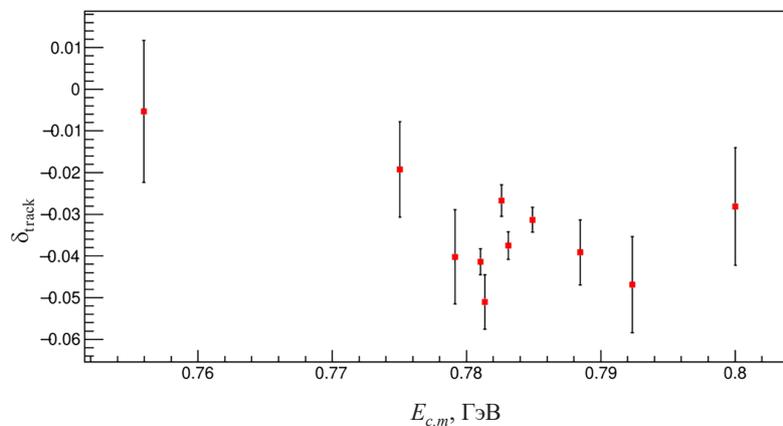


Рис. 6. Поправка на эффективность реконструкции двух треков в дрейфовой камере, δ_{track}

Fig. 6. The track reconstruction efficiency correction coefficient, δ_{track}

В настоящее время продолжается анализ систематических ошибок. Основными источниками систематической погрешности являются: неточность измерения светимости, которая оценивается на уровне 1,5–2,5 %; неточность измерения энергии пучков коллайдера ВЭПП-2000 и разброс энергии в пучке также дает вклад в неточность измерения сечения на уровне 1 %; вариации критериев отбора меняют сечения изучаемого процесса внутри коридора на уровне $\sim \pm 1$ %. Кроме того, мы оцениваем неточность поправок на распад пионов и их ядерное взаимодействие с веществом детектора не более чем 1 %. В итоге при консервативном сложении этих погрешностей наши текущие результаты измерения сечения имеют систематическую ошибку порядка 5 %.

Борновское сечение и значения параметров ω -мезона определялись решением интегрального уравнения

$$\sigma_{\text{vis}}(s) = \int_0^{x_0} dx \sigma_{\text{born}}(s(1-x))F(x,s), \tag{5}$$

где $s = 4E_{c.m.}^2$, x_0 – определяется порогом реакции, $1 - \frac{s_{\text{пор}}}{s}$, $F(x,s)$ – функция Кураева – Фадына [9], учитывающая излучение многих фотонов в коллинеарной области. Полученное сечение аппроксимировалось функцией, вычисленной в рамках модели векторной доминантности (МВД) для механизма распада через $\rho - \pi$ с учетом $(\omega - \phi)$ -интерференции [5]:

$$\sigma(s) = \frac{F_{\pi^+\pi^-\pi^0}(s)}{s^{3/2}} \left| \sum_{V=\omega,\phi} e^{i\phi_{\omega V}} \sqrt{\frac{\sigma(V \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0)M_V}{F_{\pi^+\pi^-\pi^0}(M_V^2)}} \frac{\Gamma_V M_V^2}{D_V(s)} \right|^2, \tag{6}$$

где $F_{\pi^+\pi^-\pi^0}(s)$ – фазовый объем системы трех пионов, численно рассчитанный в механизме $\rho - \pi$; $\sigma(V \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0)$, M_V , Γ_V – сечение в пике, масса и полная ширина векторного мезона V соответственно, $D_V(s) = M_V^2 - s - i\sqrt{s}\Gamma_V(s)$.

Параметры ϕ -мезона брались из справочника (PDG) и фиксировались. Во время минимизации программой MINUIT варьировались три параметра: $\sigma(V \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0)$, M_V , Γ_V . Результаты аппроксимации представлены на рис. 7, они согласуются с результатами предыдущих измерений и имеют сопоставимую точность (таблица).

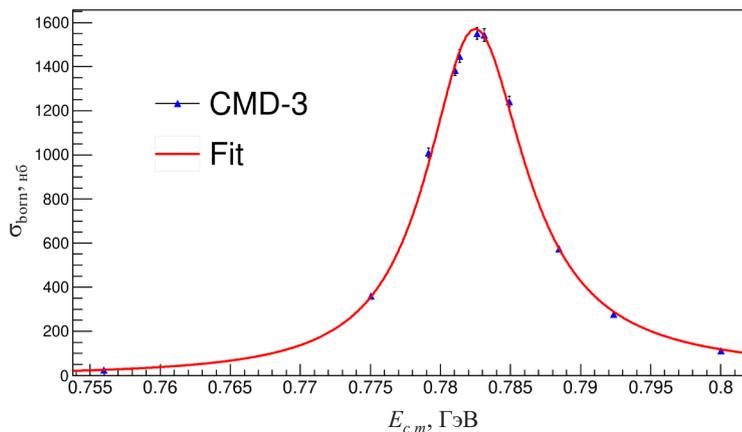


Рис. 7. Аппроксимация борновского сечения $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ в области энергий ω -мезона. Точками представлены данные CMD-3, кривой – результат их аппроксимации

Fig. 7. Fit to the Born cross section of $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ in the energy range of the ω -meson. Dots are the CMD-3 data obtained in this work and the curve is the fit result

Сравнение результатов измерения с другими экспериментами

Comparison of the results of measurement with another experiments

Детектор	M_ω , МэВ	Γ_ω , МэВ	$\sigma_0(\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0)$, нб
КМД-2	$782,71 \pm 0,07 \pm 0,04$	$8,68 \pm 0,23 \pm 0,10$	$1482 \pm 23 \pm 25$
СНД	$782,79 \pm 0,08 \pm 0,09$	$8,60 \pm 0,04 \pm 0,15$	$1615 \pm 9 \pm 57$
КМД-3	$782,70 \pm 0,02 \pm 0,11$	$8,74 \pm 0,05 \pm 0,22$	$1545 \pm 4 \pm 39$

Заключение. В работе представлены предварительные результаты измерения борновского сечения процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ в области ω -мезона, параметры которого измерены с точностью лучше предыдущих экспериментов. Ведется анализ систематических ошибок, вклад которых на текущий момент оценивается на уровне 5 %. Детектор КМД-3 в области энергий ω -мезона набрал интегральную светимость порядка 40 пб^{-1} , анализ которой позволит значительно улучшить точность измерения сечений и параметров ω -мезона.

Благодарности. Авторы работы выражают благодарность коллективу ВЭПП-2000 за обеспечение отличной работы комплекса во время набора статистики. Работа поддержана грантами Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (№ Ф20Р-053) и Российского фонда фундаментальных исследований (№ 20-52-00008 Бел_а).

Acknowledgements. The authors would like to express their sincere gratitude to the VEPP-2000 team for ensuring excellent operation of the complex during the data-taking run. The work was supported by grants of the Belarusian Republican Foundation for Basic Research (no. F20R-053) and the Russian Foundation for Basic Research (no. 20-52-00008 Бел_а).

Список использованных источников

1. Updated estimate of the muon magnetic moment using revised results from e^+e^- annihilation / M. Davier [et al.] // Eur. Phys. J. C. – 2003. – Vol. 31, № 4. – P. 503–510. <https://doi.org/10.1140/epjc/s2003-01362-6>
2. Precise Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment / H. N. Brown [et al. Muon (g-2) Collaboration] // Phys. Rev. Lett. – 2001. – Vol. 86, № 11. – P. 2227–2231. https://doi.org/10.1142/9789812701909_0003
3. A new approach for measuring the muon anomalous magnetic moment and electric dipole moment / M. Abe [et. al.] // Prog. Theor. Exp. Phys. – 2019. – Vol. 5, № 5. – P. 053C02.
4. Khazin, B. I. Physics and Detectors for VEPP-2000 / B. I. Khazin // Nucl. Phys. B – Proc. Supplements. – 2008. – Vol. 181/182. – P. 376–380. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysbps.2008.09.068>
5. Study of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ in the energy region below 0.98 GeV / M. N. Achasov [et al.] // Phys. Rev. D. – 2003. – Vol. 68, № 5. – P. 052006–052006-20.
6. Measurement of ω meson parameters in $\pi^+\pi^-\pi^0$ decay mode with CMD-2 / R. R. Akhmetshin [et al.] // Phys. Lett. B. – 2000. – Vol. 376, № 1/2. – P. 33–39. [https://doi.org/10.1016/s0370-2693\(00\)00123-4](https://doi.org/10.1016/s0370-2693(00)00123-4)
7. Backscattering of Laser Radiation on Ultrarelativistic Electrons in a Transverse Magnetic Field: Evidence of MeV-Scale Photon Interference / E. V. Abakumova [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2010. – Vol. 110, № 14. – P. 140402. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.110.140402>
8. Verkerke, W. The RooFit toolkit for data modeling [Electronic resource] / W. Verkerke, D. Kirkby. – Mode of access: <https://arxiv.org/abs/physics/0306116>. – Date of access: 15.10. 2020.
9. Kuraev, E. A. On Radiative Corrections to e^+e^- Single Photon Annihilation at High-Energy / E. A. Kuraev, V. S. Fadin // Sov. J. Nucl. Phys. – 1985. – Vol. 41. – P. 466–472.

References

1. Davier M., Eidelman S., Hoecker A., and Zhang Z. Updated estimate of the muon magnetic moment using revised results from e^+e^- annihilation. *The European Physical Journal C*, 2003, vol. 31, no. 4, pp. 503–510. <https://doi.org/10.1140/epjc/s2003-01362-6>
2. Brown H. N., Bunce G., Carey R. M., Cushman P., Danby G. T., Debevec P. T., Deile M., Deng H., Deninger W., Dhawan S. K., Druzhinin V. P. [et al. Muon (g-2) Collaboration]. Precise Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment. *Physical Review Letters*, 2001, vol. 86, no. 11, pp. 2227–2231. https://doi.org/10.1142/9789812701909_0003
3. Abe M., Bae S., Beer G., Bunce G., Choi H., Choi S., Chung M., da Silva W., Eidelman S., Finger M., Fukao Y. [et. al.] A new approach for measuring the muon anomalous magnetic moment and electric dipole moment. *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2019, vol. 5, no. 5, pp. 053C02.
4. Khazin B. I. Physics and Detectors for VEPP-2000. *Nuclear Physics B – Proceedings Supplements*, 2008, vol. 181–182, pp. 376–380. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysbps.2008.09.068>
5. Achasov M. N., Beloborodov K. I., Berdyugin A. V., Bogdanchikov A. G., Bozhenok A. V., Bukin A. D., Bukin D. A. [et al.]. Study of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ in the energy region below 0.98 GeV. *Physical Review D*, 2003, vol. 68, no. 5, pp. 052006–052006-20.

6. Akhmetshin R. R., Anashkin E. V., Aulchenko V. M., Banzarov V. Sh., Barkov L. M., Baru S. E., Bashtovoy N. S., Bondar A. E., Bondarev D. V., Chernyak D. V., Eidelman S. I., Fedotov G. V., Gabyshev N. I., Grebeniuk A. A., Grigoriev D. N. [et al.]. Measurement of ω meson parameters in $\pi^+\pi^-\pi^0$ decay mode with CMD-2. *Physics Letters B*, 2000, vol. 376, no. 1–2, pp. 33–39. [https://doi.org/10.1016/s0370-2693\(00\)00123-4](https://doi.org/10.1016/s0370-2693(00)00123-4)

7. Abakumova E. V., Achasov M. N., Berkaev D. E., Kaminsky V. V., Muchnoi N. Yu., Perevedentsev E. A., Pyata E. E., Shatunov Yu. M. Backscattering of Laser Radiation on Ultrarelativistic Electrons in a Transverse Magnetic Field: Evidence of MeV-Scale Photon Interference. *Physical Review Letters*, 2010, vol. 110, no. 14, pp. 140402. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.110.140402>

8. Verkerke W., Kirkby D. *The RooFit toolkit for data modeling*. Available at <https://arxiv.org/abs/physics/0306116> (Accessed 15 October 2020).

9. Kuraev E. A., Fadin V. S. On Radiative Corrections to e^+e^- Single Photon Annihilation at High-Energy. *Soviet Journal of Nuclear Physics*, 1985, vol. 41, pp. 466–472.

Информация об авторах

Василевская Дарья Сергеевна – младший научный сотрудник, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: d.vasilevskaya@dragon.bas-net.by, <https://orcid.org/0000-0002-1193-5237>

Григорьев Дмитрий Николаевич – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), заведующий лабораторией, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), доцент, Новосибирский государственный технический университет (пр. К. Маркса, 20, 630073, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: d.n.grigoriev@inp.nsk.su

Дудко Игорь Георгиевич – научный сотрудник, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: igordudko89@gmail.com

Иванов Вячеслав Львович – научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: vyacheslav_lvovich_ivanov@mail.ru

Казанин Василий Федорович – старший научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), старший преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: v.kazanine@mail.ru

Козырев Алексей Николаевич – научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: AKozyrev@inp.nsk.su

Рубан Александр Анатольевич – старший научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: ruban@inp.nsk.su

Information about the authors

Darya S. Vasileuskaya – Junior Researcher, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: d.vasilevskaya@dragon.bas-net.by. <https://orcid.org/0000-0002-1193-5237>

Dmitry N. Grigoriev – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Head of the Laboratory, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State Technical University, (20, K. Marksa Ave., 630073, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: d.n.grigoriev@inp.nsk.su

Igor G. Dudko – Researcher, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: igordudko89@gmail.com

Vyacheslav L. Ivanov – Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: vyacheslav_lvovich_ivanov@mail.ru

Vasily F. Kazanin – Senior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: v.kazanine@mail.ru

Aleksey N. Kozyrev – Senior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: AKozyrev@inp.nsk.su

Aleksandr A. Ruban – Senior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: ruban@inp.nsk.su

Artem E. Ryzhenkov – Junior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the

Рыжененков Артем Евгеньевич – младший научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), старший преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация).
E-mail: a.e.ryzhenenkov@inp.nsk.su

Толмачев Сергей Сергеевич – аспирант, старший лаборант, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация).
E-mail: s.s.tolmachev@inp.nsk.su

Федотович Геннадий Васильевич – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), профессор, заведующий кафедрой физики ФФ и СУНЦ НГУ, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: fedotovich@inp.nsk.su

Шемякин Дмитрий Николаевич – научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), старший преподаватель кафедры общей физики, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: dimnsh@yandex.ru

Шёлковый Дмитрий Викторович – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: shoukavy@ifanbel.bas-net.by

Эпштейн Леонид Борисович – научный сотрудник, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация), научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 11, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация); старший преподаватель, Новосибирский государственный технический университет (пр. К. Маркса, 20, 630073, г. Новосибирск, Российская Федерация). E-mail: l.b.epshteyn@inp.nsk.su

Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Senior Lecturer, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation).

E-mail: a.e.ryzhenenkov@inp.nsk.su

Sergey S. Tolmachev – Postgraduate Student, Senior Laboratory Assistant, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), E-mail: s.s.tolmachev@inp.nsk.su

Gennady V. Fedotovich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Chief Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Professor, Head of the Department, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation).

E-mail: v.kazanine@mail.ru

Dmitry N. Shemyakin – Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Assistant Professor, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: dimnsh@yandex.ru

Dzmitry V. Shoukavy – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: shoukavy@ifanbel.bas-net.by

Leonid B. Epshteyn – Researcher, Novosibirsk State University (2, Pirogova Str., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (11, Akademika Lavrentieva Ave., 630090, Novosibirsk, Russian Federation), Senior Lecturer, Novosibirsk State Technical University (20, K. Marks Ave., 630073, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: l.b.epshteyn@inp.nsk.su

ISSN 1561-2430 (Print)
 ISSN 2524-2415 (Online)
 УДК 621.373.826
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-459-469>

Поступила в редакцию 10.08.2020
 Received 10.08.2020

Р. В. Чулков, О. П. Корожан, В. А. Орлович

Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

СТАТИСТИКА ФЛУКТУАЦИЙ ЭНЕРГИЙ ИМПУЛЬСОВ ГЕНЕРАЦИИ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ЛАЗЕРА НА ВЫНУЖДЕННОМ КОМБИНАЦИОННОМ РАССЕЯНИИ

Аннотация. Приводятся результаты исследования статистики флуктуаций энергий импульсов генерации ВКР-лазера с оптической накачкой многомодовыми импульсами наносекундной длительности. Методами численного моделирования системы связанных дифференциальных уравнений для медленно меняющихся амплитуд поля накачки и первых трех стоксовых компонент, выполненных с учетом пространственной неоднородности пучка накачки, спонтанных шумов и оптической обратной связи, обнаружено резкое увеличение амплитуды флуктуаций в нелинейном режиме ВКР-преобразования при согласовании оптической длины резонатора ВКР-лазера с длиной резонатора многомодового лазера накачки. Так, при средней эффективности преобразования в излучение 1-й стоксовой компоненты 3,5–3,8 % расчеты показали возрастание коэффициента вариации (КВ) случайной величины с 9 до 118 %. В линейном режиме ВКР-преобразования, когда эффективность преобразования составляет 0,2–0,03 %, предсказано дальнейшее увеличение значения КВ до 270–500 %. Численно показано, что статистика флуктуаций в условиях согласования длин резонаторов является существенно негауссовой и описывается распределениями плотности вероятности (РПВ) L-вида с максимумами, расположенными вблизи нуля и длинными хвостами. Результаты расчетов количественно подтверждены экспериментом для ВКР-лазера на кристалле нитрата бария в припороговых условиях его работы, когда эффективность преобразования в излучение 1-й стоксовой компоненты не превышала 0,3 %. Резонатор такого лазера был сформирован двумя плоскими зеркалами, обеспечивающими конфигурацию двухпроходной накачки. При возбуждении ВКР-лазера линейно-поляризованными импульсами 2-й гармоники Nd:АИГ-лазера длительностью 7–8 нс реализован режим работы первого, характеризующий гиперэкспоненциальными РПВ с КВ, достигающими 480 %, что в 2–2,5 раза превышает их значения для условий однопроходного ВКР.

Ключевые слова: вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР), ВКР-лазер, статистика флуктуаций, коэффициент вариации, распределение плотности вероятности

Для цитирования. Чулков, Р. В. Статистика флуктуаций энергий импульсов генерации твердотельного лазера на вынужденном комбинационном рассеянии / Р. В. Чулков, О. П. Корожан, В. А. Орлович // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 459–469. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-459-469>

Ruslan V. Chulkov, Olga P. Korozhan, Valentin A. Orlovich

B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

STATISTICS OF PULSE ENRGY FLUCTUATIONS IN A SOLID-STATE RAMAN LASER

Abstract. In this paper, we present the results of the study of the statistics of pulse energy fluctuations in a Raman laser under optical pump by the multimode nanosecond pulses. A system of coupled differential equations for slowly varying envelopes of the pump field and first three Stokes lines was integrated numerically with taking into account spatial inhomogeneity of the pump beam, spontaneous noise, and optical feedback. Data of the numerical simulation revealed a sharp increase in the fluctuation amplitude in the nonlinear regime of Raman frequency conversion when the optical length of the Raman cavity was matched with the cavity length of the multimode pump laser. At a mean 1st Stokes conversion efficiency of 3.5–3.8 %, the calculations showed an increase in the coefficient of variation (CV) of a random value from 9 % to 118 %. In the linear regime of Raman frequency conversion, when the conversion efficiency was 0.2–0.03 %, a further increase in the CV value up to 270–500 % was predicted. It is also numerically shown that the fluctuation statistics under the conditions of the cavity length matching is essentially non-Gaussian and described by the L-type probability density distributions (PDDs) with long tails and maxima located near zero. The numerical data were quantitatively confirmed by an experiment for a Raman laser on a barium nitrate crystal operated near the Raman threshold, when the 1st Stokes conversion efficiency did not exceed 0.3 %. A Raman cavity was formed by two flat mirrors providing a double-pass pump configuration. The Raman laser was excited by the linearly polarized frequency-doubled radiation of a Q-switched Nd:YAG laser generating multimode pulses with a duration of 7–8 ns. A Raman laser operating regime characterized by the hyperexponential PDDs with CVs reaching 480 %, which is 2–2.5 times higher than those observed earlier for the single-pass conditions of stimulated Raman scattering, was realized.

Keywords: stimulated Raman scattering (SRS), Raman laser, statistics of fluctuations, coefficient of variation, probability density distribution

For citation. Chulkov R. V., Korozhan O. P., Orlovich V. A. Statistics of pulse energy fluctuations in a solid-state Raman laser. *Vestsi Natsyianal'най akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 459–469 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-459-469>

Введение. Прогнозирование и предупреждение событий, в ходе которых амплитуды наблюдаемых величин могут многократно превосходить их средние значения, является важным направлением статистической физики. Такие события, включая аномально большие волны на поверхности океана [1], стихийные бедствия [2, 3], падение валютного и фондового рынков [4], аварии на транспорте и транспортный коллапс [5], блэкаут электросетей [6], отказы электроники [7] и т. д., как правило, подчиняются существенно негауссовой статистике, часто именуемой статистикой экстремальных значений (СЭЗ). СЭЗ характеризуется распределениями плотностей вероятности (РПВ) L-вида с сильно вытянутыми хвостами. В оптике подобные распределения, которые обычно связывают с формированием блуждающих волн и спорадических солитонов [8], описывают генерацию суперконтинуума в оптических волокнах [8], образование филаментов в газах [9], волокнах [10] и нелинейных оптических резонаторах [11], флуктуации интенсивности в параметрических усилителях [12] и волоконных лазерах с синхронизацией мод [13]. Было показано, что существенная роль в формировании РПВ L-вида в нелинейных системах принадлежит модуляционной неустойчивости в присутствии шумовых начальных условий [8, 10, 12].

Вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР), развиваясь с уровня спонтанных шумов, является еще одним примером нелинейно-оптического явления, в котором крупномасштабные флуктуации спектра [14], длительности [15], интенсивности [16] и энергии импульсов [17–19, 25] возможны. Предыдущие исследования статистики флуктуаций энергий стоксовых импульсов однопроходного ВКР в газах [20–24], кристаллах [25] и оптических волокнах [26–28] выявили, что в условиях когерентного взаимодействия в линейном режиме ВКР-преобразования, когда истощением излучения накачки можно пренебречь, она описывается экспоненциальным РПВ с максимумом вблизи нуля [20–23] и относительным разбросом (коэффициентом вариации) случайной величины, который приближается к 100 % [20, 21]. В случае же спектрально-широкополосной накачки флуктуации становятся гиперэкспоненциальными, а разброс может достигать [24] и даже превышать [26] 200 %.

В настоящей работе мы приводим результаты исследований статистики флуктуаций энергий импульсов генерации твердотельного ВКР-лазера. Мы показываем, что в условиях, когда в качестве оптической накачки такого лазера используются наносекундные многомодовые импульсы, вид РПВ существенным образом зависит от согласования оптической длины его резонатора с длиной резонатора лазера накачки. В случае такого согласования ВКР-лазер генерирует импульсы с энергией, статистика флуктуаций значений которой отлична от гауссовой и от экспоненциальной. Как в линейном, так и в нелинейном режимах ВКР-преобразования она характеризуется РПВ L-вида с максимумом вблизи нуля и коэффициентом вариации, превышающим 100 %. При этом, возрастая при приближении к порогу ВКР, амплитуда флуктуаций достигает 500 %, демонстрируя тем самым сверххаотичный режим работы ВКР-лазера с гиперэкспоненциальной СЭЗ.

Описание эксперимента. В качестве накачки использовалось излучение 2-й гармоники многомодового Nd:АИГ-лазера с активной модуляцией добротности резонатора, оптическая длина которого L_p составляла 48 см. На длине волны $\lambda_0 = 532$ нм лазер генерировал линейно-поляризованные импульсы излучения длительностью $\tau_p \sim 7$ нс и спектральной шириной $\delta\omega_0 \sim 0,7$ см⁻¹. Энергия импульсов достигала 90 мДж, ее среднеквадратичное отклонение от номинального значения находилось в пределах 1,4–3,0 %. ВКР происходило в кристалле нитрата бария (НБ) длиной 70 мм. Нитрат бария является оптически изотропным кристаллом, в котором наиболее сильный комбинационный переход имеет частотный сдвиг 1047 см⁻¹ [29], что при возбуждении в нем ВКР излучением накачки с длиной волны 532 нм обеспечивало длины волн генерации 563; 599 и 639 нм для 1-й, 2-й и 3-й стоксовых компонент (СК) соответственно. Пучок накачки диаме-

тром 3–4 мм направлялся в кристалл, торцы которого были вырезаны под углом Брюстера для предотвращения оптической обратной связи. Сам кристалл был помещен в отдельный резонатор, сформированный двумя плоскими селективными диэлектрическими зеркалами, одно из которых имело достаточное пропускание на длине волны накачки. Коэффициенты отражения этих зеркал (табл. 1) обеспечивали реализацию двухпроходной геометрии накачки кристалла и эффективную обратную связь на длинах волн первых двух стоксовых компонент. Выходное зеркало устанавливалось на моторизованную подвижку, которая обеспечивала плавную подстройку длины резонатора ВКР-лазера. Спектральная селекция излучения стоксовых компонент, генерируемых ВКР-лазером, осуществлялась цветными стеклянными фильтрами.

Таблица 1. Коэффициенты отражения зеркал резонатора ВКР-лазера

Table 1. Reflection coefficients for the Raman cavity mirrors

Зеркало	Коэффициент отражения на длине волны, %			
	532 нм	563 нм	599 нм	639 нм
Входное	28	99	48	26
Выходное	>99	86	>99	36

Энергии импульсов генерации лазера накачки и ВКР-лазера измерялись синхронно двухканальным интерфейсом Ophir Pulsar-2 с пьезоэлектрическими детекторами PE9 и PE10. Для того чтобы корректно прописать весь диапазон значений энергий отдельных импульсов ВКР-лазера, вблизи порога его генерации использовался подход, при котором измерения отдельной последовательности энергий импульсов генерации производились в два или три этапа в течение равных промежутков времени на каждом этапе. При этом пределы измерений на втором и третьем этапах устанавливались таким образом, чтобы они были на порядок величины меньше пределов предыдущих этапов (рис. 1, *a*). Полученные предварительные результаты измерений далее программно обрабатывались, когда события текущего этапа, значения которых находились ниже предела измерений последующего этапа и выше предела измерения предыдущего этапа, отбрасывались (рис. 1, *b*). После этого производился статистический анализ отфильтрованных вышеуказанным способом событий. Описанный подход корректен, если последовательность импульсов, генерируемая ВКР-лазером, является стационарным случайным процессом. Это условие выполнялось с хорошим приближением по истечении 40–60 мин с момента начала генерации.

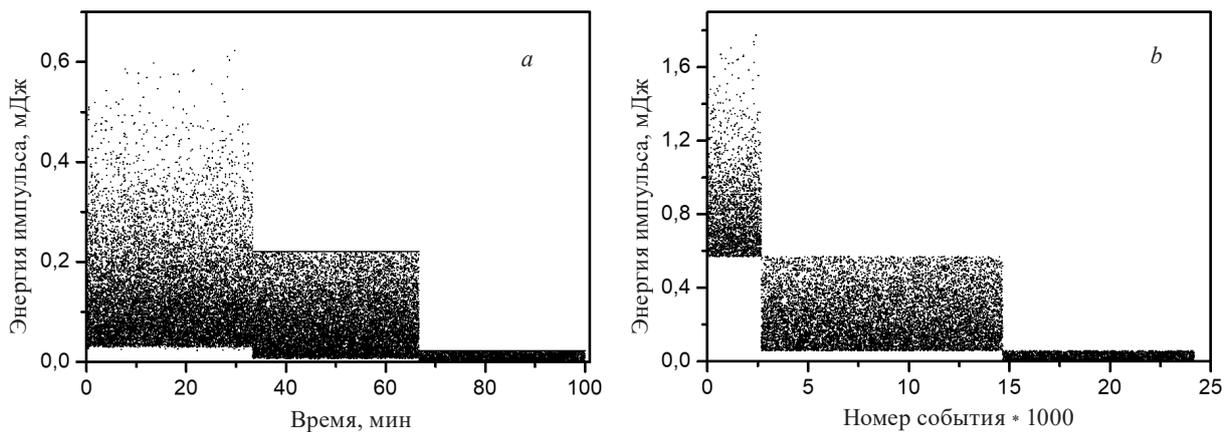


Рис. 1. Примеры временной разверстки результатов измерений энергий импульсов генерации 1 СК ВКР-лазера: *a* – экспериментально зарегистрированная измерителем энергии на трех разных пределах измерений 1 мДж, 200 и 20 мкДж; *b* – после программной обработки с учетом пропускания светофильтров

Fig. 1. Examples of time series of the energy measurement results for the 1st Stokes pulses generated by the Raman laser: *a* – experimentally recorded by the energy meter at three different measurement ranges 1 mJ; 200 μJ; and 20 μJ; *b* – after software processing with taking into account the filter transmission

С целью снижения влияния на результаты статистического анализа энергий импульсов генерации ВКР-лазера флуктуаций энергий импульсов лазера накачки статистическая обработка выполнялась только для тех событий, для которых значения энергий импульсов лазера накачки попадали в диапазон, в пределах которого их среднеквадратичное отклонение не превышало 1 %. События вне границ этого диапазона отбрасывались.

Численная модель. Программный код для расчета ВКР-генерации в поле многомодовых лазерных импульсов базировался на системе связанных дифференциальных уравнений для медленно меняющихся амплитуд [30]:

$$\left(\pm \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\eta_n}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) A_n^\pm = -\frac{\alpha_n}{2} A_n^\pm + (Q_n^{\pm\pm})^* A_{n-1}^\pm + (Q_n^{\mp\pm})^* A_{n-1}^\mp - Q_{n+1}^{\pm\pm} A_{n+1}^\pm - Q_{n+1}^{\mp\pm} A_{n+1}^\mp, \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{T_2} \right) Q_n^{\pm\pm} = \frac{g_n}{2T_2} A_{n-1}^\pm (A_n^\pm)^* + F_n^{\pm\pm}, \quad (2)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{T_2} \right) Q_n^{\mp\pm} = \frac{g_n}{2T_2} A_{n-1}^\mp (A_n^\pm)^* + F_n^{\mp\pm}, \quad (3)$$

где z и t – соответственно продольная координата и время, A_n^\pm – комплексные амплитуды спектральных компонент поля с частотами ω_n и волновым числом k_n , знаки «+» и «-» при амплитудах соответствуют волнам, распространяющимся в попутном и обратном направлениях, соответственно, η_n и α_n – значения показателей преломления и коэффициентов поглощения активной среды на соответствующих частотах, Q_n – нормированные амплитуды фононных колебаний, g_n – стационарные коэффициенты ВКР-усиления для соответствующих компонент поля, T_2 – время поперечной релаксации доминирующего комбинационного перехода активной среды и F_n – операторы случайной силы [31]. Индекс n принимает значения от 0 до 3 при индексировании амплитуд полей, где «0» соответствует полю накачки, а «1»–«3» – стоксовым компонентам того же порядка, и от 1 до 3 при индексировании амплитуд фононных колебаний и операторов случайной силы.

Уравнения (1)–(3) описывают генерацию излучения стоксовых компонент по каскадному механизму без учета параметрического взаимодействия между отдельными компонентами в приближении плоских волн. Они интегрировались численно с использованием неявной консервативной конечно-разностной схемы интегрирования второго порядка точности по временной и пространственной координатам [32] для условий эксперимента. Параметры расчета, указанные в табл. 2, брались в соответствии с известными литературными данными. Граничные условия учитывали оптическую обратную связь на зеркалах резонатора ВКР-лазера. Импульс накачки на входе в ВКР-лазер моделировался в виде набора мод с амплитудами a_m и фазами φ_m , разделенных интервалом частот $\Omega = c / 2L_p$, c – скорость света в вакууме:

$$A_0^\pm = G \sum_m a_m \exp(im\Omega t + i\varphi_m), \quad (4)$$

где $m = 0, \pm 1, \dots, \pm m_{\max}$, а огибающая G предполагалась гауссовой по поперечной координате и времени:

$$G(r, t) = \exp \left[-\left(\frac{r}{r_0} \right)^2 - 2 \ln 2 \left(\frac{t - 2t_0}{\tau_p} \right)^2 \right]. \quad (5)$$

Значение модовой амплитуды a_m определялось ее положением в ансамбле мод с гауссовым спектральным профилем $a_m^2 = S_m$,

$$S_m = S_0 \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{\Omega}{\delta \tilde{\omega}_0 c} \right)^2 m^2 \right], \quad (6)$$

а фаза φ_m каждой моды бралась статистически независимой случайной величиной, удовлетворяющей равномерному распределению на интервале $[0, \varphi_{\max}]$. Значение φ_{\max} равно $1,75 \pi$, обеспечивало наилучшее соответствие между экспериментально измеренными и численно смоделированными импульсами накачки.

Таблица 2. Параметры расчета

Table 2. Parameters of the calculation

Параметр	Значение	Параметр	Значение
α_{0-3}	$0,07 \text{ м}^{-1}$	g_1	43 см/ГВт [33]
η_{0-3}	1,57 [27]	g_2	38 см/ГВт [33, 34]
T_2	25 пкс [27]	g_3	31 см/ГВт [33, 34]

Результаты. Результаты расчета усредненных за 100 лазерных выстрелов энергетической эффективности преобразования в импульсы попутного ВКР 1 СК, а также суммарной эффективности преобразования попутного и обратного ВКР в первые три СК представлены на рис. 2, а в зависимости от отношения оптической длины резонатора ВКР-лазера L_R к длине L_P . Представленные данные получены для нелинейного режима ВКР-преобразования, когда энергия импульсов накачки в 4–6 раз превышала порог генерации ВКР-лазера. Видно, что на фоне постепенного и монотонного падения эффективностей с ростом отношения L_R / L_P наблюдается их локальное возрастание, когда L_R равна L_P , либо $L_P / 2$. Такое возрастание объясняется увеличением коэффициента кросс-корреляции интенсивностей возбуждающего и преобразованного излучения [35]. Наряду с этим в вышеуказанных условиях резко увеличивается разброс энергий

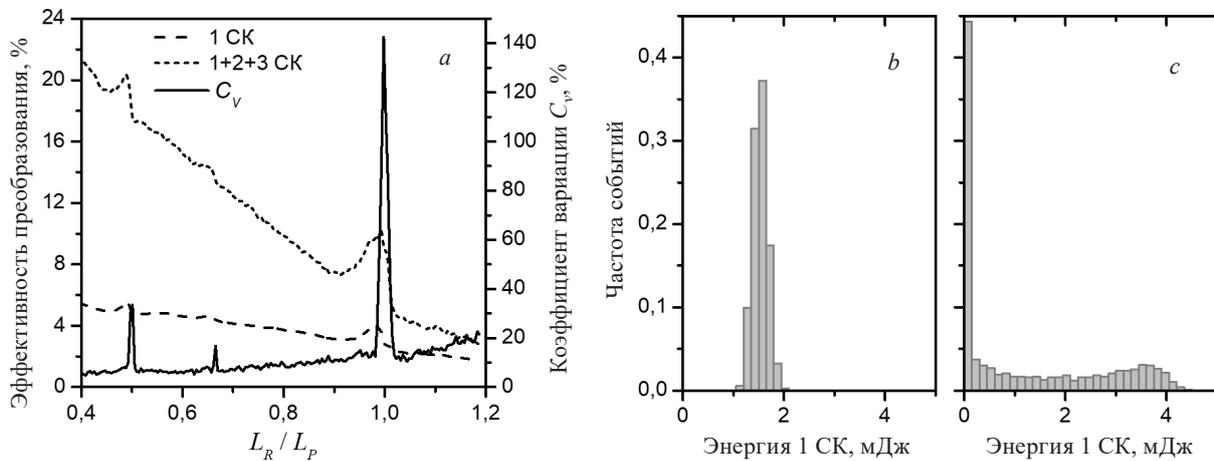


Рис. 2. Зависимости средней эффективности преобразования в импульсы попутного ВКР 1 СК, суммарной эффективности преобразования попутного и обратного ВКР (1 + 2 + 3 СК) и коэффициента вариации C_v для энергий импульсов 1 СК, численно рассчитанные при энергии накачки $E_p = 34$ мДж как функции отношения L_R к L_P (а); РПВ энергий импульсов 1 СК, рассчитанные при $E_p = 40$ мДж, $L_R / L_P = 0,89$ (b) и $E_p = 35$ мДж, $L_R / L_P = 1,0$ (c); средние значения эффективностей преобразования в излучение 1 СК для обоих РПВ (3,8 % (b) и 3,5 % (c)), приблизительно равны, в то время как значения C_v (9 % (b) и 118 % (c)) резко отличаются

Fig. 2. Dependences of the mean conversion efficiency to the forward 1st Stokes pulses (1 СК), sum conversion efficiency to the pulses of forward and backward SRS (1 + 2 + 3 СК), and coefficient of variation C_v for the 1st Stokes pulse energies, numerically calculated at the pump energy $E_p = 34$ mJ as a function of the L_R to L_P ratio (a); PDD of the 1st Stokes pulse energies calculated at $E_p = 40$ mJ, $L_R / L_P = 0,89$ (b) and $E_p = 35$ mJ, $L_R / L_P = 1,0$ (c); the mean 1st Stokes conversion efficiencies for both the PDDs, 3,8 % (b) and 3,5 % (c), are approximately equal while the C_v values, 9 % (b) and 118 % (c), are drastically different

импульсов стоксовой генерации. Так, например, значение коэффициента вариации $C_v = \Delta E / \bar{E}$ (где \bar{E} – среднее значение, а ΔE – среднеквадратичное отклонение) для энергий импульсов 1 СК возрастает более чем на порядок величины, достигая 140 %. В ВКР-преобразователях с однопроходной геометрией взаимодействия подобные высокие значения C_v ранее наблюдались лишь вблизи порога ВКР, когда эффективность преобразования в излучение стоксовой компоненты была существенно меньше 1 % [20, 21, 24, 26]. При этом значение C_v быстро снижалось с ростом эффективности преобразования. Было показано, что большая величина разброса импульсов ВКР-генерации обусловлена как вкладом квантовых шумов на этапе спонтанного комбинационного рассеяния [20, 21], так и шумами интенсивности излучения накачки [24, 26].

Расчеты, выполненные нами, показывают, что в нелинейном режиме ВКР-преобразования режим относительно стабильной генерации ВКР-лазера с многомодовой накачкой может быть реализован только в условиях отсутствия согласования длины его резонатора L_R с длиной L_P . В этом случае коэффициент вариации C_v для энергий импульсов 1 СК не должен превышать 15 %, а РПВ будет близкой к гауссовой с максимумом, расположенным вблизи среднего значения (рис. 2, *b*). В случае же точного согласования длин, форма РПВ должна резко меняться, становясь L-образной с сильно вытянутым хвостом, где наиболее вероятными будут оказываться события, значения которых близки нулю (рис. 2, *c*). Статистика флуктуаций, соответствующая РПВ подобного вида, ранее наблюдалась только вблизи порогов генерации однопроходных ВКР-преобразователей, когда истощением излучения накачки можно было пренебречь, а эффективность преобразования в стоксовое излучение не превышала долей процента [20–26]. С ростом эффективности преобразования характер флуктуаций менялся, а их статистика становилась близкой к нормальной, когда максимум РПВ располагался вблизи среднего значения [36].

Тенденцию увеличения разброса и перехода к близкой к гиперэкспоненциальной статистике флуктуаций энергий импульсов генерации ВКР-лазера в линейном режиме ВКР-преобразования демонстрирует рис. 3, на котором численно рассчитанные и экспериментально измеренные РПВ энергий импульсов 1 СК представлены для случая, когда длины резонаторов L_R и L_P равны друг другу. Как расчет, так и эксперимент показывают быстрый рост значений C_v с падением эффективности преобразования в стоксовое излучение. Так, например, при средней эффективности преобразования 0,2–0,3 % величина C_v существенно превышает 200 % (рис. 3, *c, d, g, h*), а при эффективности 0,03–0,04 % она возрастает почти до 500 % (рис. 3, *a, b, e, f*). Эта величина в 2–2,5 раза превышает ранее наблюдаемые значения C_v для условий однопроходного ВКР при широкополосной хаотической накачке в газах [24] и оптических волокнах [26].

С целью количественной характеристики того, насколько случайные процессы, представленные РПВ на рис. 3, соответствуют статистике экстремальных значений, мы рассчитали для них значения коэффициентов Парето K_{par} , которые были определены как отношения суммы 20 % событий, имеющих максимальные значения в каждой выборке данных, к сумме всех событий данной выборки. Известно, что $K_{\text{par}} = 0,44$ для случайного процесса, описываемого нормальным РПВ, в то время как $K_{\text{par}} > 0,5$ обычно связывают с резко отличной от гауссовой статистикой, характеризующейся РПВ L-вида [10, 18]. Определенные таким образом значения K_{par} составили 0,585, 0,965, 0,992, 0,9992 и $>0,9995$ для наборов событий, представленных РПВ на рис. 2, *c*, рис. 3, *d, h*, рис. 3, *c, g*, рис. 3, *a, e* и рис. 3, *b, f* соответственно. Чтобы представить себе, насколько большой разброс значений случайной величины в них, отметим, что, например, в последних двух из перечисленных наборов с вероятностью $\sim 10^{-3}$ возможно возникновение событий, в которых энергия импульсов в 80–110 раз может превышать свои средние значения.

Следует отметить, что результаты наших расчетов, выполненные для тех же условий, но в отсутствие оптической обратной связи (при нулевых коэффициентах отражения зеркал резонатора) ВКР-лазера, демонстрируют значительно меньший разброс энергий импульсов генерации (в 1,5–2 раза) в близком к линейному режиму ВКР, когда эффективности преобразования не превышают 1 %. Качественно это согласуется с известными литературными данными по статистике флуктуаций энергий импульсов однопроходного ВКР в условиях широкополосной накачки [24, 26]. В настоящее время у нас нет однозначной интерпретации обнаруженного эффекта

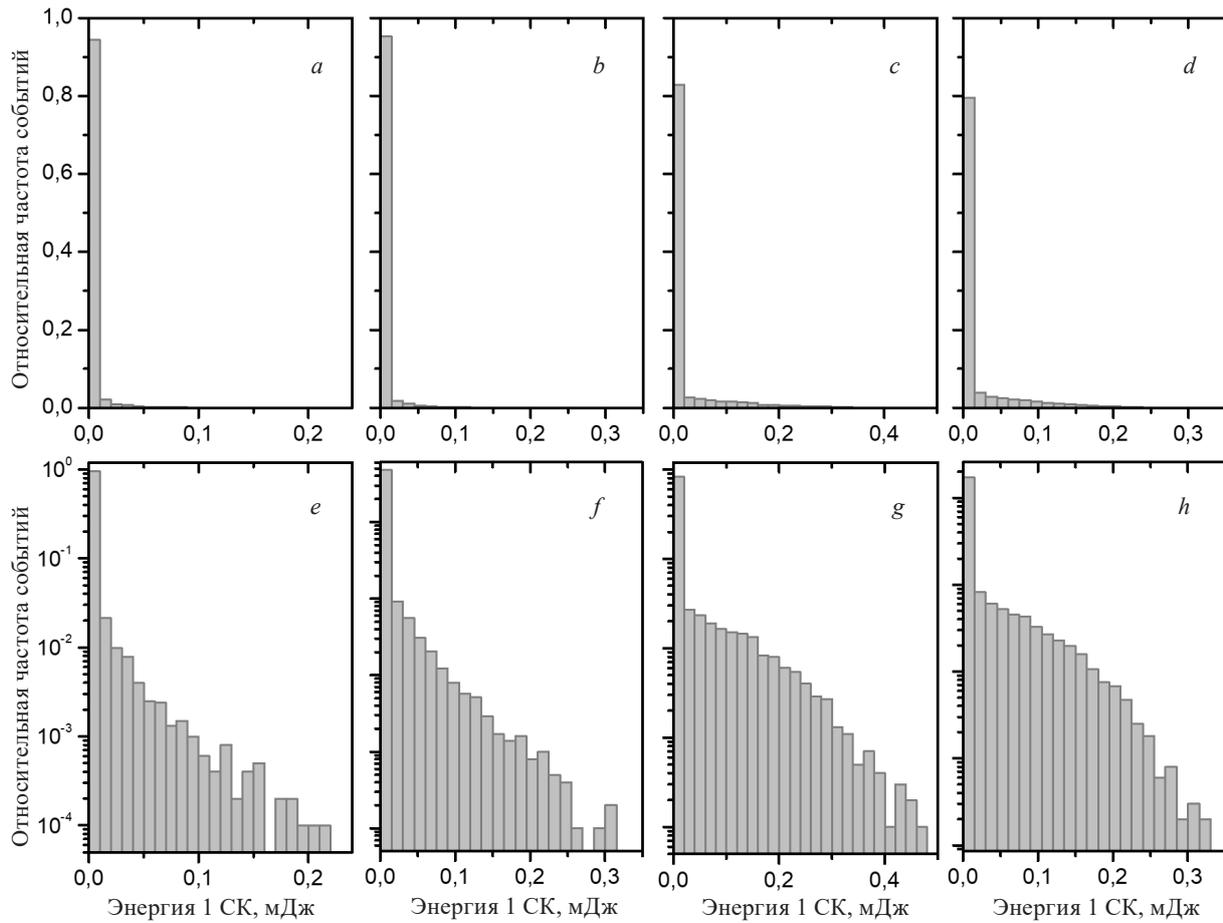


Рис. 3. Рассчитанные (*a, c, e, g*) и экспериментально измеренные (*b, d, f, h*) РПВ энергий импульсов 1 СК, представленные в линейном (*a–d*) и логарифмическом (*e–h*) масштабах, когда $L_R / L_P = 1,0$, а $E_P = 8$ мДж (*a, b, e, f*), $E_P = 10$ мДж (*c, g*), $E_P = 11$ мДж (*d, h*); средние значения эффективностей преобразования в излучение 1 СК составляли 0,03 % (*a, e*), 0,04 % (*b, f*), 0,2 % (*c, g*), 0,3 % (*d, h*), соответствующие средние энергии импульсов 1 СК составляли 2,5 мкДж (*a, e*), 2,8 мкДж (*b, f*), 21 мкДж (*c, g*), 29 мкДж (*d, h*), а значения C_v были равны 494 % (*a, e*), 484 % (*b, f*), 266 % (*c, g*) и 239 % (*d, h*)

Fig. 3. Calculated (*a, c, e, g*) and experimentally measured (*b, d, f, h*) 1st Stokes pulse energy PDDs, represented in the linear (*a–d*) and logarithmic (*e–h*) scales, when $L_R / L_P = 1.0$ and $E_P = 8$ mJ (*a, b, e, f*), $E_P = 10$ mJ (*c, g*), $E_P = 11$ mJ (*d, h*); the mean 1st Stokes conversion efficiencies were 0.03 % (*a, e*), 0.04 % (*b, f*), 0.2 % (*c, g*), 0.3 % (*d, h*), the corresponding mean 1st Stokes pulse energies were 2.5 μ J (*a, e*), 2.8 μ J (*b, f*), 21 μ J (*c, g*), 29 μ J (*d, h*), and the C_v values were equal to 494 % (*a, e*), 484 % (*b, f*), 266 % (*c, g*), and 239 % (*d, h*)

возрастания амплитуды флуктуаций энергий стоксовых импульсов при ВКР в условиях оптической обратной связи. Возможное объяснение этому заключается во влиянии многолучевой интерференции на зеркалах резонатора ВКР-лазера, которая приводит к дополнительным флуктуациям интенсивности излучения накачки внутри него. Такие флуктуации возникают ввиду того, что фазовые соотношения для различных компонент интерферирующих волн накачки варьируются от выстрела к выстрелу как по причине флуктуаций спектра импульса накачки, так и из-за изменения оптической длины L_R вследствие механических вибраций зеркал резонатора ВКР-лазера. Рост амплитуды флуктуаций энергий импульсов накачки, вызванный эффектом многолучевой интерференции на зеркалах резонатора ВКР-лазера, ранее был обнаружен при возбуждении ВКР спектрально-ограниченными лазерными импульсами [33].

Заключение. В работе исследована статистика флуктуаций энергий импульсов генерации 1 СК твердотельного ВКР-лазера при накачке наносекундными многомодовыми импульсами. Для надпорогового режима работы ВКР-лазера, когда эффективность преобразования энергии

накачки в излучение 1 СК составляет несколько процентов, результаты численного моделирования выявили увеличение амплитуды флуктуаций более чем на порядок величины, если оптическая длина резонатора ВКР-лазера согласована с длиной резонатора лазера накачки. Эти результаты позволили также установить, что статистика флуктуаций должна быть существенно негауссова и характеризоваться РПВ L-вида с максимумом вблизи нуля и коэффициентом вариации C_v , достигающим 140 %. С падением эффективности преобразования в стоксовое излучение численные результаты показали увеличение относительной амплитуды флуктуаций и рост значений C_v . Результаты расчетов были количественно подтверждены экспериментальными данными для ВКР-лазера на кристалле нитрата бария. Для припорогового режима работы ВКР-лазера они продемонстрировали возможность реализации сверххаотичного режима работы такого лазера, при котором амплитуда флуктуаций энергий импульсов его генерации приближается к 500 %, что в 2–2,5 раза превышает ранее наблюдаемые значения C_v для условий однопроходного ВКР.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта № Ф20Р-064.

Acknowledgements. The work was carried out under the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Basic Research within the framework of project no. Ф20Р-064.

Список использованных источников

1. Walker, D. A. G. The shape of large surface waves on the open sea and the Draupner New Year wave / D. A. G Walker, P. H Taylor., R. E Taylor // *Appl. Ocean Res.* – 2004. – Vol. 26, № 3/4. – P. 73–83. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2005.02.001>
2. Statistics of Extreme Events with Application to Climate / H. Abarbanel [et al.] // *JASON.* – 1992. – JSR-90-30S. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2005.02.001>
3. Alvarado, E. Modeling Large Forest Fires as Extreme Events / E. Alvarado, D. V. Sandberg, S. G. Pickford // *Northwest Sci.* – 1998. – Vol. 72. – P. 66–75.
4. Embrechts, P. Statistical Methods for Extremal Events / P. Embrechts, C. Klüppelberg, T. Mikosch // *Modelling extremal events for insurance and finance.* – Berlin: Springer Verlag, 1997. – P. 283–370. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-33483-2>
5. Collision prediction in roundabouts: a comparative study of extreme value theory approaches / F. Orsini [et al.] // *Transportmetrica A: Transport Science.* – 2019. – Vol. 15, № 2. – P. 556–572. <https://doi.org/10.1080/23249935.2018.1515271>
6. Carreras, B. A. North American Blackout Time Series Statistics and Implications for Blackout Risk / B. A. Carreras, D. E. Newman, I. Dobson // *IEEE Trans. Power Syst.* – 2016. – Vol. 31, № 6. – P. 4406–4414. <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2015.2510627>
7. Extreme Value Based Estimation of Critical Single Event Failure Probability [Electronic Resource] / G. I. Zebrev [et al.] // arXiv. – 2019. – Mode of access: <https://arxiv.org/abs/1909.07804v1>
8. Optical rogue waves / D. R Solli [et al.] // *Nature.* – 2007. – Vol. 450, № 7172. – P. 1054–1058. <https://doi.org/10.1038/nature06402>
9. Spatiotemporal Rogue Events in Optical Multiple Filamentation / S. Birkholz [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 111, № 24. – P. 243903. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.243903>
10. Optical rogue wave statistics in laser filamentation / J. Kasparian [et al.] // *Opt. Expr.* – 2009. – Vol. 17, № 14. – P. 1270–1275. <https://doi.org/10.1364/OE.17.012070>
11. Non-Gaussian statistics and extreme waves in a nonlinear optical cavity / A. Montina [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – Vol. 103, № 17. – P. 173901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.173901>
12. Hammani, K. Emergence of extreme events in fiber-based parametric processes driven by a partially incoherent pump wave / K. Hammani, C. Finot, G. Millot // *Opt. Lett.* – 2009. – Vol. 34, № 8. – P. 1138–1140. <https://doi.org/10.1364/OL.34.001138>
13. Soto-Crespo, J. M. Dissipative rogue waves: extreme pulses generated by passively mode-locked lasers / J. M. Soto-Crespo, Ph. Grelu, N. Akhmediev // *Phys. Rev. E.* – 2011. – Vol. 84, № 1. – P. 016604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.016604>
14. MacPherson, D. C. Quantum Fluctuations in the Stimulated-Raman-Scattering Linewidth / D. C. MacPherson, R. C. Swanson, J. L. Carlsten // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 61, № 1. – P. 66–69. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.66>
15. Raymer, M. G. Temporal quantum fluctuations in stimulated Raman scattering: Coherent-modes description / M. G. Raymer, Z. W. Li, I. A. Walmsley // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 63, № 15. – P. 1586–1589. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.1586>
16. Control of transverse spatial modes in transient stimulated Raman amplification / M. D. Duncan [et al.] // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 1990. – Vol. 7, № 7. – P. 1336–1345. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.7.001336>
17. Hammani, K. Extreme statistics in Raman fiber amplifiers: From analytical description to experiments / K. Hammani, A. Picozzi, C. Finot // *Opt. Commun.* – 2011. – Vol. 284, № 10/11. – P. 2594–2603. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2011.01.057>
18. Aalto, A. Extreme-value statistics in supercontinuum generation by cascaded stimulated Raman scattering / A. Aalto, G. Genty, J. Toivonen // *Opt. Expr.* – 2010. – Vol. 18, № 2. – P. 1234–1239. <https://doi.org/10.1364/OE.18.001234>

19. Monfared, Y. E. Non-Gaussian statistics and optical rogue waves in stimulated Raman scattering / Y. E. Monfared, S. A. Ponomarenko // *Opt. Expr.* – 2017. – Vol. 25, № 6. – P. 5941–5950. <https://doi.org/10.1364/OE.25.005941>
20. Fabricius, N. Macroscopic Manifestation of Quantum Fluctuations in Transient Stimulated Raman Scattering / N. Fabricius, K. Nattermann, D. von der Linde // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol. 52, № 2. – P. 113–116. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.113>
21. Walmsley, I. A. Observation of Macroscopic Quantum Fluctuations in Stimulated Raman Scattering / I. A. Walmsley, M. G. Raymer // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 50, № 13. – P. 962–965. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.962>
22. Raymer, M. G. III The quantum coherence properties of stimulated Raman scattering / M. G. Raymer, I. A. Walmsley // *Progr. Opt.* – 1990. – Vol. 28. – P. 247–255. [https://doi.org/10.1016/S0079-6638\(08\)70290-7](https://doi.org/10.1016/S0079-6638(08)70290-7)
23. Statistical characteristics of the energies of pulses of forward and backward stimulated Raman scattering under linear, intermediate, and nonlinear scattering conditions / P. A. Apanasevich [et al.] // *Sov. J. of Quant. Electron.* – 1992. – Vol. 22, № 9. – P. 822–827. <https://doi.org/10.1070/qe1992v022n09abeh003607>
24. Grabtchikov, A. S. Pulse-energy statistics in the linear regime of stimulated Raman scattering with a broad-band pump / A. S. Grabtchikov, A. I. Vodtchits, V. A. Orlovich // *Phys. Rev. A.* – 1997. – Vol. 56, № 2. – P. 1666–1669. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.1666>
25. Borlaug, D. Extreme Value Statistics in Silicon Photonics / D. Borlaug, S. Fathpour, B. Jalali // *IEEE Phot. J.* – 2009. – Vol. 1, № 1. – P. 33–39. <https://doi.org/10.1109/JPHOT.2009.2025517>
26. Increased Stokes pulse energy variation from amplified classical noise in a fiber Raman generator / A. Betlej [et al.] // *Opt. Expr.* – 2005. – Vol. 13, № 8. – P. 2948–2960. <https://doi.org/10.1364/OPEX.13.002948>
27. First Stokes pulse energy statistics for cascade Raman generation in optical fiber / J. Chang [et al.] // *Opt. Commun.* – 1997. – Vol. 139, № 4/6. – P. 227–231. [https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(97\)00060-6](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(97)00060-6)
28. Headley, C. Noise Characteristics and Statistics of Picosecond Stokes Pulses Generated in Optical Fibers Through Stimulated Raman Scattering / C. Headley, G. P. Agrawal // *IEEE J. Quant. Electr.* – 1995. – Vol. 31, № 11. – P. 2058–2067. <https://doi.org/10.1109/3.469288>
29. Physical, chemical, and optical properties of barium nitrate Raman crystal / P. G. Zverev [et al.] // *Opt. Mater.* – 1999. – Vol. 11, № 4. – P. 315–334. [https://doi.org/10.1016/S0925-3467\(98\)00031-7](https://doi.org/10.1016/S0925-3467(98)00031-7)
30. Self-mode locking at multiple Stokes generation in the Raman laser / V. A. Lisinetskii [et al.] // *Opt. Commun.* – 2010. – Vol. 283, № 7. – P. 1454–1458. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2009.11.047>
31. Battle, P. R. Quantum limit on noise in a Raman amplifier / P. R. Battle, R. C. Swanson, J. L. Carlsten // *Phys. Rev. A.* – 1991. – Vol. 44, № 3. – P. 1992–1930. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.1922>
32. Карамзин, Ю. Н. Математическое моделирование в нелинейной оптике / Ю. Н. Карамзин, А. П. Сухоруков, В. А. Трофимов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 154 с.
33. Steady-state Raman gain coefficients of potassium-gadolinium tungstate at the wavelength of 532 nm / R. V. Chulkov [et al.] // *Opt. Mater.* – 2015. – Vol. 50. – P. 92–98. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.10.004>
34. Raman gain coefficient of barium nitrate measured for the spectral region of Ti:Sapphire laser / V. A. Lisinetskii [et al.] // *J. Nonlin. Opt. Phys. & Mater.* – 2005. – Vol. 14, № 1. – P. 107–114. <https://doi.org/10.1142/s0218863505002530>
35. Cavity length matching and optical resonances in a Raman laser with the multimode pump source / R. V. Chulkov [et al.] // *Opt. Lett.* – 2017. – Vol. 42, № 23. – P. 4824–4827. <https://doi.org/10.1364/OL.42.004824>
36. Statistical characteristics of the pulse energies for forward and backward SRS in linear, intermediate, and nonlinear scattering modes / P. A. Apanasevich [et al.] // *Quant. Electron.* – 1992. – Vol. 19. – P. 884–890.

References

1. Walker D. A. G., Taylor P. H., Taylor R. E. The shape of large surface waves on the open sea and the Draupner New Year wave. *Applied Ocean Research*, 2004, vol. 26, no. 3–4, pp. 73–83. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2005.02.001>
2. Abarbanel H., Koonin S., Levine H., MacDonald G., Rothaus O. Statistics of Extreme Events with Application to Climate. *JASON*, 1992, JSR-90-30S. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2005.02.001>
3. Alvarado E., Sandberg D. V., Pickford S. G. Modeling Large Forest Fires as Extreme Events. *Northwest Science*, 1998, vol. 72, pp. 66–75.
4. Embrechts P., Klüppelberg C., Mikosch T. Statistical Methods for Extremal Events. *Modelling extremal events for insurance and finance*. Berlin, Springer Verlag, 1997, pp. 283–370. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-33483-2>
5. Orsini F., Gecchele G., Gastaldi M., Rossi R. Collision prediction in roundabouts: a comparative study of extreme value theory approaches. *Transportmetrica A: Transport Science*, 2019, vol. 15, no. 2, pp. 556–572. <https://doi.org/10.1080/23249935.2018.1515271>
6. Carreras B. A., Newman D. E., Dobson I. North American Blackout Time Series Statistics and Implications for Blackout Risk. *IEEE Transactions on Power Systems*, 2016, vol. 31, no. 6, pp. 4406–4414. <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2015.2510627>
7. Zebrev G. I., Galimov A. M., Useinov R. G., Fateev I. A. Extreme Value Based Estimation of Critical Single Event Failure Probability. *arXiv*, 2019. Available at: <https://arxiv.org/abs/1909.07804v1>
8. Solli D. R., Ropers C., Koonath P., Jalali B. Optical rogue waves, *Nature*, 2007, vol. 450, no. 7172, pp. 1054–1058. <https://doi.org/10.1038/nature06402>

9. Birkholz S., Nibbering E. T. J., Brée C., Skupin S., Demircan A., Genty G., Steinmeyer G. Spatiotemporal Rogue Events in Optical Multiple Filamentation. *Physical Review Letters*, 2013, vol. 111, no. 24, pp. 243903. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.243903>
10. Kasparian J., BÉjot P., Wolf J-P., Dudley J. M. Optical rogue wave statistics in laser filamentation. *Optics Express*, 2009, vol. 17, no. 14, pp. 1270–1275. <https://doi.org/10.1364/OE.17.012070>
11. Montina A., Bortolozzo U., Residori S., Arecchi F. T. Non-Gaussian statistics and extreme waves in a nonlinear optical cavity. *Physical Review Letters*, 2009, vol. 103, no. 17, pp. 173901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.173901>
12. Hammani K., Finot C., Millot G. Emergence of extreme events in fiber-based parametric processes driven by a partially incoherent pump wave. *Optics Letters*, 2009, vol. 34, no. 8, pp. 1138–1140. <https://doi.org/10.1364/OL.34.001138>
13. Soto-Crespo J. M., Grelu Ph., Akhmediev N. Dissipative rogue waves: extreme pulses generated by passively mode-locked lasers. *Physical Review E*, 2011, vol. 84, no. 1, pp. 016604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.016604>
14. MacPherson D. C., Swanson R. C., Carlsten J. L. Quantum Fluctuations in the Stimulated-Raman-Scattering Linewidth. *Physical Review Letters*, 1988, vol. 61, no. 1, pp. 66–69. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.66>
15. Raymer M. G., Li Z. W., Walmsley I. A. Temporal quantum fluctuations in stimulated Raman scattering: Coherent-modes description. *Physical Review Letters*, 1989, vol. 63, no. 15, pp. 1586–1589. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.1586>
16. Duncan M. D., Mahon R., Tankersley L. L., Reintjes J. Control of transverse spatial modes in transient stimulated Raman amplification. *Journal of the Optical Society of America B*, 1990, vol. 7, no. 7, pp. 1336–1345. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.7.001336>
17. Hammani K., Picozzi A., Finot C., Extreme statistics in Raman fiber amplifiers: From analytical description to experiments. *Optics Communications*, 2011, vol. 284, no. 10–11, pp. 2594–2603. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2011.01.057>
18. Aalto A., Genty G., Toivonen J. Extreme-value statistics in supercontinuum generation by cascaded stimulated Raman scattering. *Optics Express*, 2010, vol. 18, no. 2, pp. 1234–1239. <https://doi.org/10.1364/OE.18.001234>
19. Monfared Y. E., Ponomarenko S. A. Non-Gaussian statistics and optical rogue waves in stimulated Raman scattering. *Optics Express*, 2017, vol. 25, no. 6, pp. 5941–5950. <https://doi.org/10.1364/OE.25.005941>
20. Fabricius N., Nattermann K., D. von der Linde. Macroscopic Manifestation of Quantum Fluctuations in Transient Stimulated Raman Scattering. *Physical Review Letters*, 1984, vol. 52, no. 2, pp. 113–116. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.113>
21. Walmsley I. A., Raymer M. G. Observation of Macroscopic Quantum Fluctuations in Stimulated Raman Scattering. *Physical Review Letters*, 1983, vol. 50, no. 13, pp. 962–965. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.962>
22. Raymer M. G., Walmsley I. A. III The quantum coherence properties of stimulated Raman scattering, *Progress in Optics*, 1990, vol. 28, pp. 247–255. [https://doi.org/10.1016/S0079-6638\(08\)70290-7](https://doi.org/10.1016/S0079-6638(08)70290-7)
23. Apanasevich P. A., Gakhovich D. E., Grabchikov A. S., Kilin S. Y., Kozich V. P., Kontsevoi B. L., Orlovich V. A. Statistical characteristics of the energies of pulses of forward and backward stimulated Raman scattering under linear, intermediate, and nonlinear scattering conditions. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 1992, vol. 22, no. 9, pp. 822–827. <https://doi.org/10.1070/qe1992v022n09abeh003607>
24. Grabchikov A. S., Vodtchits A. I., Orlovich V. A. Pulse-energy statistics in the linear regime of stimulated Raman scattering with a broad-band pump. *Physical Review A*, 1997, vol. 56, no. 2, pp. 1666–1669. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.1666>
25. Borlaug D., Fathpour S., Jalali B. Extreme Value Statistics in Silicon Photonics. *IEEE Photonics Journal*, 2009, vol. 1, no. 1, pp. 33–39. <https://doi.org/10.1109/JPHOT.2009.2025517>
26. Betlej A., Schmitt P., Sidereas P., Tracy R., Goedde C. G., Thompson J. R. Increased Stokes pulse energy variation from amplified classical noise in a fiber Raman generator. *Optics Express*, 2005, vol. 13, no. 8, pp. 2948–2960. <https://doi.org/10.1364/OPEX.13.002948>
27. Chang J., Baiocchi D., Vas J., Thompson J. R. First Stokes pulse energy statistics for cascade Raman generation in optical fiber. *Optics Communications*, 1997, vol. 139, no. 4–6, pp. 227–231. [https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(97\)00060-6](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(97)00060-6)
28. Headley C., Agrawal G. P. Noise Characteristics and Statistics of Picosecond Stokes Pulses Generated in Optical Fibers Through Stimulated Raman Scattering. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1995, vol. 31, no. 11, pp. 2058–2067. <https://doi.org/10.1109/3.469288>
29. Zverev P. G., Basiev T. T., Osiko V. V., Kulkov A. M., Voitsekhovskii V. N. Physical, chemical, and optical properties of barium nitrate Raman crystal. *Optical Materials*, 1999, vol. 11, no. 4, pp. 315–334. [https://doi.org/10.1016/S0925-3467\(98\)00031-7](https://doi.org/10.1016/S0925-3467(98)00031-7)
30. Lisinetskii V. A., Busko D. N., Chulkov R. V., Grabchikov A. S., Apanasevich P. A., Orlovich V. A. Self-mode locking at multiple Stokes generation in the Raman laser. *Optics Communications*, 2010, vol. 283, no. 7, pp. 1454–1458. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2009.11.047>
31. Battle P. R., Swanson R. C., Carlsten J. L. Quantum limit on noise in a Raman amplifier. *Physical Review A*, 1991, vol. 44, no. 3, pp. 1992–1930. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.1922>
32. Karamzin Y. N., Sukhorukov A. P., Trophimov V. A. *Mathematical Modeling in Nonlinear Optics*. Moscow, Publishing House of Moscow State University, 1989. 154 p. (in Russian).
33. Chulkov R. V., Markevich V. Y., Orlovich V. A., El-Desouki M. M. Steady-state Raman gain coefficients of potassium-gadolinium tungstate at the wavelength of 532 nm. *Optical Materials*, 2015, vol. 50, pp. 92–98. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.10.004>
34. Lisinetskii V. A., Mishkel' I. I., Chulkov R. V., Grabchikov A. S., Apanasevich P. A., Eichler H. J., Orlovich V. A. Raman gain coefficient of barium nitrate measured for the spectral region of Ti:Sapphire laser. *Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials*, 2005, vol. 14, no. 1, pp. 107–114. <https://doi.org/10.1142/s0218863505002530>

35. Chulkov R. V., Markevich V. Y., Alyamani A. Y., Cheshev E. A., Orlovich V. A. Cavity length matching and optical resonances in a Raman laser with the multimode pump source. *Optics Letters*, 2017, vol. 42, no. 23, pp. 4824–4827. <https://doi.org/10.1364/OL.42.004824>

36. Apanasevich P. A., Gakhovich D. E., Killin S. Y., Kozich V. P., Kontsevoi B. L., Orlovich V. A. Statistical characteristics of the pulse energies for forward and backward SRS in linear, intermediate, and nonlinear scattering modes. *Quantum Electronics*, 1992, vol. 19, pp. 884–890.

Информация об авторах

Чулков Руслан Владимирович – кандидат физико-математических наук, заведующий центром «Нелинейная оптика и активированные материалы», Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: r.chulkov@dragon.bas-net.by

Корожан Ольга Петровна – младший научный сотрудник центра «Нелинейная оптика и активированные материалы», Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: o.korozhan@dragon.bas-net.by

Орлович Валентин Антонович – академик Национальной академии наук Беларуси, доктор физико-математических наук, профессор, академик-секретарь Отделения физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, научный руководитель центра «Нелинейная оптика и активированные материалы», Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: v.orlovich@dragon.bas-net.by

Information about the authors

Ruslan V. Chulkov – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Center “Nonlinear optics and activated materials”, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (Nezavisimosti Ave., 68-2, 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: r.chulkov@dragon.bas-net.by

Olga P. Korozhan – Junior Researcher at the Center “Nonlinear optics and activated materials”, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (Nezavisimosti Ave., 68-2, 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: o.korozhan@dragon.bas-net.by

Valentin A. Orlovich – Academician of the National Academy of Sciences of Belarus, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Academician-Secretary of the Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of the Republic of Belarus, Supervisor of the Center “Nonlinear optics and activated materials”, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (Nezavisimosti Ave., 68-2, 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.orlovich@dragon.bas-net.by

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 535.37+621.373

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-470-479>

Поступила в редакцию 05.11.2020

Received 05.11.2020

Е. А. Барбарчик¹, О. В. Буганов¹, А. Д. Замковец¹, С. А. Тихомиров¹,
Фан Вьет Тип², Фам Хон Мынь²

¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²Институт физики Вьетнамской академии наук и технологий, Ханой, Вьетнам

СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕСТАЦИОНАРНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР СЕРЕБРО–ФТАЛОЦИАНИН МЕДИ

Аннотация. Представлены результаты исследования с фемтосекундным временным разрешением нестационарных спектров поглощения гибридных наноструктур на основе островковых пленок серебра и фталоцианина меди (CuPc). Установлено, что динамика нестационарных спектров поглощения гибридной системы (Ag–CuPc)⁶Ag отражает существующее взаимное влияние плазмонной и органической подсистем на характеристики электронных состояний и спектрально-кинетические свойства друг друга. Время релаксации основной компоненты в кинетике релаксации наведенного поглощения на длине волны $\lambda = 525$ нм ($\tau \sim 15$ пс), обусловленной синглет-триплетной релаксацией, для органической подсистемы CuPc суммарной толщиной $l \sim 40$ нм в гибридной структуре заметно короче времени релаксации ($\tau \sim 50$ пс) аналогичной компоненты для чистой пленки фталоцианина меди такой же толщины. Предполагается, что присутствие наночастиц серебра в гибридной структуре (Ag–CuPc)⁶Ag влияет на вероятность интеркомбинационных переходов в органической подсистеме, ускоряя переход молекул CuPc в долгоживущее триплетное состояние.

Ключевые слова: поверхностный плазмонный резонанс, гибридные наноструктуры, фемтосекундная спектроскопия, нестационарные спектры поглощения

Для цитирования. Спектрально-кинетические свойства нестационарного поглощения гибридных наноструктур серебро–фталоцианин меди / Е. А. Барбарчик [и др.] // Вес. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 470–479. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-470-479>

Katsiaryna A. Barbarchyk¹, Oleg V. Buganov¹,
Anatoly D. Zamkovets¹, Sergei A. Tikhomirov¹, Phung Viet Tiep², Pham Hong Minh²

¹B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

²Institute of Physics of the Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

SPECTRAL-KINETIC PROPERTIES OF TRANSIENT ABSORPTION OF HYBRID SILVER–COPPER PHTHALOCYANINE NANOSTRUCTURES

Abstract. In this paper, we studied the dynamics of transient absorption spectra of a hybrid nanostructure (Ag–CuPc)⁶Ag based on island silver films and copper phthalocyanine thin films, as well as individual structural units of this system, by femtosecond transient absorption spectroscopy. It is found that the effects observed for a hybrid nanostructure reflect the existing mutual influence of the plasmonic and organic subsystems on the spectral-kinetic characteristics of each other. The characteristic time of the main component of induced optical density kinetics at a wavelength $\lambda = 525$ nm ($\tau \sim 15$ ps) that is caused by singlet-triplet relaxation of the excited electronic states of the organic subsystem of the hybrid structure is noticeably shorter than the relaxation time ($\tau \sim 50$ ps) at the same wavelength for a pure copper phthalocyanine film of 40 nm thickness, just the same as the total thickness of the organic subsystem in the hybrid structure. It is assumed that the presence of silver nanoparticles in the hybrid structure (Ag–CuPc)⁶Ag, affects the probability of intersystem conversion in the organic subsystem, accelerating the transition of CuPc molecules to a long-lived triplet state due to a strong local field near the surface of the plasmon particle. The triplet-triplet absorption spectrum of copper phthalocyanine in the spectral range 470–750 nm was obtained.

Keywords: surface plasmon resonance, hybrid nanostructures, femtosecond spectroscopy, transient absorption spectra.

For citation. Barbarchyk K. A., Buganov O. V., Zamkovets A. D., Tikhomirov S. A., Phung Viet Tiep, Pham Hong Minh. Spectral-kinetic properties of transient absorption of hybrid silver–copper phthalocyanine nanostructures. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 470–479 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-470-479>

Введение. Фталоцианины относятся к обширному классу макрогетероциклических соединений. Они обладают высокой устойчивостью к повышенным температурам и агрессивным средам [1]. Наряду с выполнением функций красителей и пигментов, данные соединения, вследствие наличия у них делокализованных электронных состояний в цепях сопряжения, являются перспективными для использования в оптоэлектронике. Тонкие пленки данных материалов представляют несомненный интерес для создания светоизлучающих устройств [2], фотовольтаических ячеек [3], активных элементов сенсорных устройств [4].

В последние десятилетия активизируются исследования по модификации оптических свойств тонкопленочных органических материалов за счет использования в сочетании с ними плазмонных наночастиц, характеризующихся наличием полос поверхностного плазмонного резонанса поглощения (ППРП) в видимом диапазоне, а также обладающих способностью существенно усиливать электромагнитные поля вблизи своей поверхности. Ближнеполевые эффекты играют важную роль в процессах гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) [5], усиления люминесценции [6], увеличения эффективного поглощения тонких органических пленок [7].

Представляют интерес возможности управления сверхбыстрым оптическим откликом гибридных плазмонных нанокомпозитов на фемтосекундное лазерное возбуждение, связанные с эффектами плазмон-зависимой модификации спектрально-кинетических характеристик гибридных нанокомпозитов при возбуждении излучением с частотой, попадающей в область полосы ППРП [8]. Эффекты подобного рода проявляются в наличии быстрой компоненты в кинетике релаксации просветления полос поглощения органической пленки фталоцианина меди, коррелирующей с кинетикой восстановления полосы ППРП наночастиц серебра. Регистрируемое в этих экспериментах быстрорелаксирующее просветление в полосах поглощения органической пленки и его динамика обусловлены не изменением населенностей энергетических состояний этой пленки, а являются результатом изменения состояния наночастиц серебра в окружении органических молекул (разогрев и последующее охлаждение электронов до температуры решетки) и, соответственно, изменения амплитуды локальных полей. Этот эффект может оказаться полезным при разработке новых типов динамических устройств – модуляторов, переключателей на основе гибридных плазмонных нанокомпозитов. Для практической реализации таких устройств необходимо детально исследовать влияние состава и микроструктуры гибридных наноструктур на их стационарные и нестационарные оптические спектры.

В настоящей работе приводятся результаты исследования спектральных и спектрально-кинетических свойств гибридных нанокомпозитов на основе островковых пленок серебра и тонких пленок фталоцианина меди, входящих в состав многослойной системы $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$. Целью работы является изучение быстропротекающих процессов релаксации энергии электронного возбуждения в таких наноструктурах при их возбуждении в полосе плазмонного резонанса фемтосекундными лазерными импульсами и установление закономерностей влияния плазмонной подсистемы на спектрально-кинетические характеристики нестационарного поглощения фталоцианина меди в гибридной наноструктуре.

Объекты и методика исследований. Экспериментальные образцы, представляющие собой гетероструктуры и их компоненты, изготавливались на вакуумной установке ВУ-1А термическим осаждением используемых материалов на подложки из стекла и кварца. Контроль толщин осаждаемых слоев производился кварцевым датчиком. Давление остаточных газов составляло $\sim 2 \cdot 10^{-3}$ Па. Температуры подложек были комнатными. Гетероструктуры представляли собой последовательно осажденные чередующиеся слои фталоцианина меди и островковых пленок серебра эффективной толщины $h_1 \sim 7$ нм и $h_2 \sim 2$ нм соответственно. Эффективная толщина h определялась по формуле $h = m / m_0 S$, где m – масса осажденного на подложку материала, m_0 – его объемная плотность, S – площадь подложки. Были приготовлены также отдельные образцы, представляющие собой островковую пленку серебра как компонент гетероструктуры и пленку фталоцианина меди с толщиной, эквивалентной суммарной толщине органической подсистемы гетероструктуры. Стационарные спектры поглощения образцов записывались на спектрофотометре Cary 500.

Нестационарные спектры наведенного поглощения регистрировались с использованием фемтосекундного спектрометра [9], в основе которого лежит оригинальный генератор фемтосекундных импульсов – лазер на сапфире с титаном с импульсной синхронной накачкой и многопроходный усилитель. При проведении измерений применялась методика «возбуждения-зондирования». Возбуждение проводилось на длине волны 395 нм. Длительность импульса составляла ~140 фс, энергия поддерживалась на уровне 5 мкДж. Диаметр пятна возбуждения на образце составлял 2 мм. В качестве зондирующего излучения использовался фемтосекундный суперконтинуум, генерируемый в кювете с водой при фокусировке части излучения основной гармоники титан-сапфирового лазера. Изменение оптической плотности ΔD рассчитывалось по формуле $\Delta D(\lambda, t) = \lg(T_0 / T)$, где $T = I_{\text{проб}} / I_{\text{оп}}$ и $T_0 = I_{\text{проб}}^0 / I_{\text{оп}}^0$ – отношения энергий пробного и опорного импульсов при наличии возбуждения в образце и без него соответственно. Опорный импульс всегда проходит через возбуждаемый объем образца до прихода импульса возбуждения. Пробный импульс проходит через возбуждаемый объем с задаваемым сдвигом относительно импульса возбуждения. Спектры обоих импульсов для каждой лазерной вспышки в спектральной области 400–750 нм регистрировались системой на основе полихроматора и ПЗС-матрицы с последующей обработкой данных микропроцессором и получением дифференциальных спектров поглощения.

Результаты и обсуждение. На рис. 1 приведены стационарные спектры поглощения изготовленных образцов. Можно видеть, что для нанослоя серебра эффективной толщины $h \sim 2$ нм (кривая 1) в области длин волн 400–550 нм наблюдается полоса ПППП с максимумом на длине волны 480 нм. Наличие этой полосы свидетельствует о наноструктурированности слоя (островковой пленки) Ag. Анализ микроснимков данного слоя показывает, что средний размер частиц серебра d_{cp} составляет ~5 нм, а плотность их упаковки в монослой соответствует параметру перекрытия $\eta \sim 0,6$. Кривая 2 на рис. 1 является спектральной характеристикой пленки CuPc толщиной $l \sim 40$ нм. В области спектра 600–750 нм расположена Q-полоса электронного поглощения с максимумами на $\lambda_1 \sim 625$ нм и $\lambda_2 \sim 700$ нм. Расположенная в ближнем УФ ($\lambda \sim 350$ нм) полоса Sore для данной пленки перекрывается с краем поглощения стеклянной подложки. Кривая 3 на рис. 1 соответствует спектру поглощения гибридной структуры $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$, состоящей из семи монослоев наночастиц Ag, разделенных пленками CuPc толщиной ~7 нм. Конструктивные параметры (толщина, плотность упаковки) всех монослоев металлических наночастиц в гетероструктуре являются одинаковыми (соответствуют монослою, представленному кривой 1). Сравнительный анализ спектральных характеристик образцов, представленных на рис. 1, показывает, что для гетероструктуры $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$ оптическая плотность в спектральном диапазоне

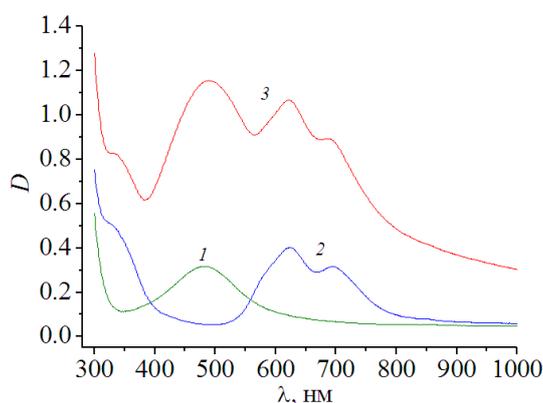


Рис. 1. Спектры оптической плотности монослоя серебра со средним размером частиц $d_{\text{avg}} \sim 5$ нм и плотностью упаковки, соответствующей параметру перекрытия $\eta \sim 0,6$ (1); пленки CuPc толщиной $l \sim 40$ нм (2); гибридной структуры $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$, состоящей из 7 монослоев Ag, разделенных пленками CuPc толщиной ~7 нм (3)

Fig. 1. Optical density spectra of a silver monolayer with an average particle size of $d_{\text{avg}} \sim 5$ nm and a packing density related to the overlap parameter $\eta \sim 0.6$ (1); a CuPc film with a thickness of $l \sim 40$ nm (2); a hybrid structure $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$ consisting of 7 Ag monolayers separated by CuPc films with a thickness of ~7 nm (3)

$\lambda > 600$ нм, где расположены длинноволновые полосы поглощения CuPc, превышает сумму оптических плотностей составляющих компонентов, т. е. наличие плазмонных наночастиц приводит к увеличению эффективного поглощения органического полупроводника в составе гетероструктуры.

На рис. 2, *a* представлены дифференциальные спектры поглощения монослоя серебра, полученные при различных значениях времени задержки. Воздействие возбуждающего лазерного импульса на монослой Ag приводит к уменьшению интенсивности и уширению полосы поверхностного плазмонного резонанса поглощения. В дифференциальных нестационарных спектрах это проявляется как наведенное просветление в спектральной области вблизи максимума полосы ППРП и наведенное поглощение на ее краях. Этот обратимый эффект обусловлен быстрым разогревом электронного газа в металлических наночастицах в результате воздействия фемто-секундных импульсов, релаксация которого в исходное состояние осуществляется главным образом за счет взаимодействия горячих электронов с поверхностью наночастиц и решеткой. Следует отметить, что в нашем случае максимум отрицательных значений ΔD в дифференциальных спектрах поглощения монослоя Ag существенно (~50 нм) смещен в коротковолновую область относительно максимума полосы ППРП в стационарном спектре. Это обусловлено тем, что имеет место разброс наночастиц серебра по размерам, в результате чего формируется неоднородно уширенная полоса ППРП. Импульс с длиной волны $\lambda = 395$ нм преимущественно возбуждает более мелкие плазмонные частицы, вызывая просветление, смещенное в коротковолновую область. Кинетика релаксации наведенных изменений в максимуме полосы просветления ($\lambda = 433$ нм) при выбранном уровне возбуждения $E_{\text{возб}} = 5$ мкДж удовлетворительно описывается моноэкспоненциальной функцией с постоянной 3,7 пс (рис. 2, *b*).

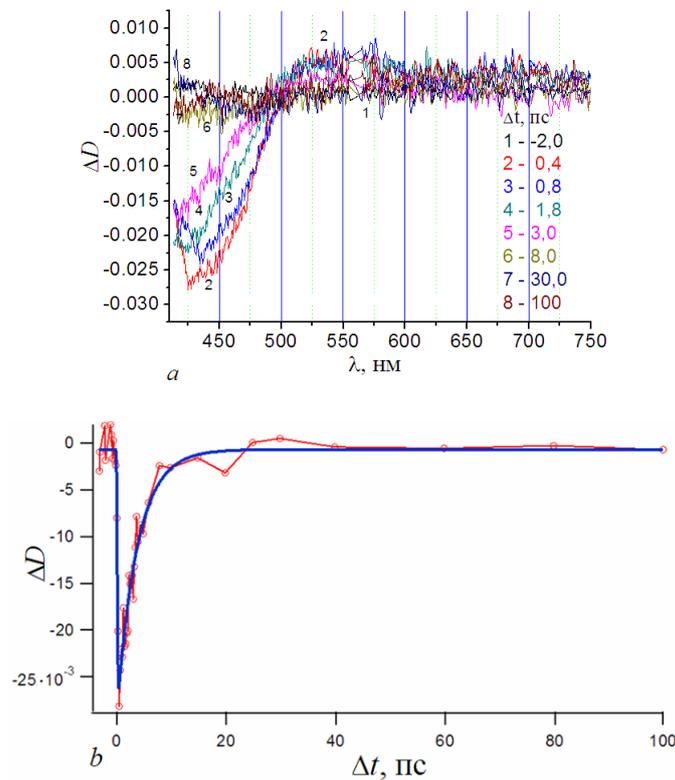


Рис. 2. Дифференциальные спектры поглощения монослоя наночастиц Ag, $d_{\text{ср}} \sim 5$ нм, $\eta \sim 0,6$. $E_{\text{возб}} = 5$ мкДж, $\lambda_{\text{возб}} = 395$ нм (*a*). Кинетика релаксации наведенной оптической плотности в максимуме полосы просветления ($\lambda = 433$ нм) монослоя наночастиц серебра, $\tau \sim 3,7$ пс (*b*)

Fig. 2. The differential absorption spectra of a Ag nanoparticles monolayer. $d_{\text{avg}} \sim 5$ nm, $\eta \sim 0.6$. $E_{\text{exc}} = 5$ μ J, $\lambda_{\text{exc}} = 395$ nm (*a*). The kinetics of the relaxation of induced optical density at the maximum of the silver monolayer bleaching band ($\lambda = 433$ nm), $\tau \sim 3.7$ ps (*b*)

В представленных на рис. 3, *a* дифференциальных спектрах оптической плотности нанослоя CuPc толщиной $l \sim 40$ нм можно выделить полосу наведенного $S_1 \rightarrow S_n$ поглощения (в области 470–550 нм с максимумом на $\lambda \sim 525$ –530 нм) и преимущественно отрицательный сигнал в спектральной области, соответствующей стационарному поглощению (область 550–750 нм). Непосредственно после возбуждения образца в дифференциальном спектре регистрируются две полосы просветления с выраженными максимумами на $\lambda = 625$ нм и $\lambda = 710$ нм, соответствующими максимумам полос стационарного поглощения. Дальнейшая модификация дифференциальных спектров определяется изменением населенностей возбужденных состояний CuPc

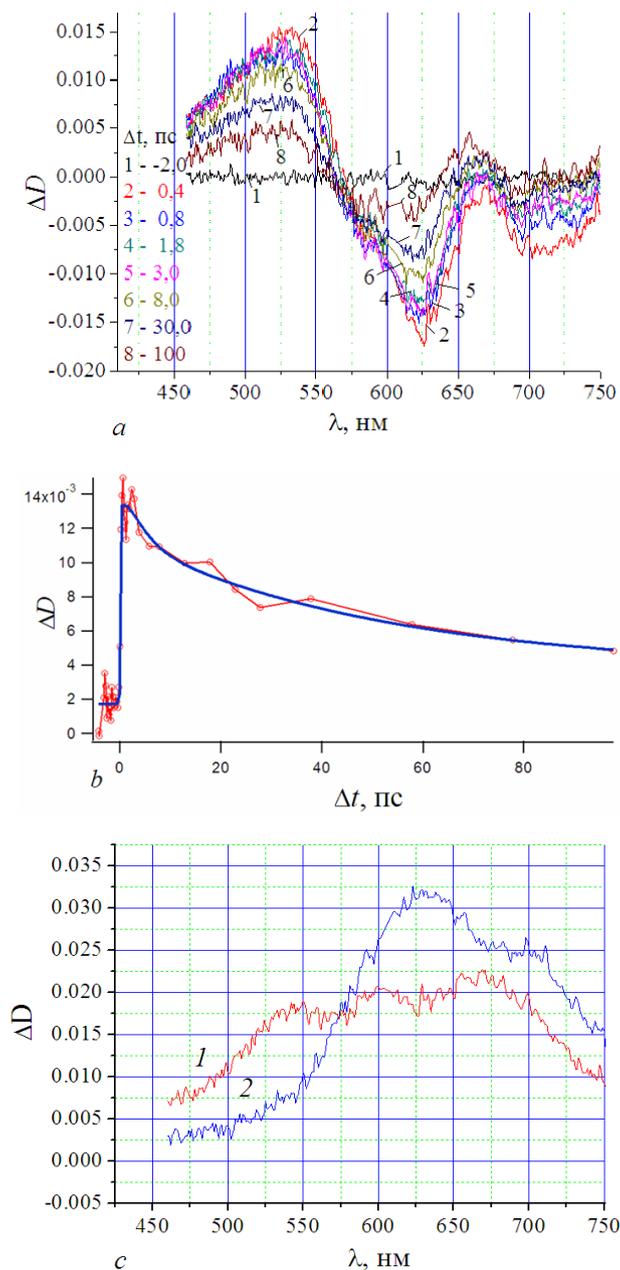


Рис. 3. Дифференциальные спектры поглощения пленки CuPc $l \sim 40$ нм. $E_{\text{возб}} = 5$ мкДж, $\lambda_{\text{возб}} = 395$ нм (*a*). Кинетика наведенной оптической плотности пленки CuPc $l \sim 40$ нм на длине волны $\lambda = 525$ нм (*b*). Восстановленные спектры нестационарного поглощения пленки CuPc при времени задержки 0,4 (*1*) и 100 пс (*2*) (*c*)

Fig. 3. The differential absorption spectra of a CuPc $l \sim 40$ nm film. $E_{\text{exc}} = 5$ μ J, $\lambda_{\text{exc}} = 395$ nm (*a*). The kinetics of the induced optical density of a CuPc film ($l \sim 40$ nm) at a wavelength of $\lambda = 525$ nm (*b*). The recovered transient absorption spectra of a CuPc film with a delay time of 0.4 (*1*), and 100 ps (*2*) (*c*)

в результате релаксационных процессов. Основной вклад в кинетику релаксации полосы наведенного поглощения в спектральной области вблизи 525 нм вносит экспонента со временем затухания 50 пс (рис. 3, *b*), характеризующая уменьшение заселенности возбужденного синглетного состояния за счет быстрой интеркомбинационной конверсии, которая у фталоцианина меди является основным каналом дезактивации возбужденных синглетных состояний [10]. В спектральной области, соответствующей стационарному спектру поглощения, кинетика наведенной оптической плотности имеет существенно более сложный характер, что обусловлено возможным наложением спектров затухающего $S_1 \rightarrow S_n$ поглощения, образующегося долгоживущего $T_1 \rightarrow T_n$ поглощения и, соответственно, долгоживущего просветления. Учитывая, что основным каналом релаксации возбужденного синглетного состояния является интеркомбинационный переход в триплетное состояние, в результате чего спектры просветления в рассматриваемом временном диапазоне должны оставаться практически неизменными, можно перейти к восстановленным нестационарным спектрам поглощения из возбужденных состояний за вычетом эффектов, связанных с просветлением. На рис. 3, *c* приведены полученные нестационарные спектры нанослоя CuPc толщиной $l \sim 40$ нм для двух временных задержек. Наблюдается существенная трансформация во времени измеряемых нестационарных спектров поглощения, обусловленная переходом возбужденных синглетных молекул в триплетное состояние. Нестационарный спектр поглощения на больших задержках фактически соответствует триплет-триплетному поглощению фталоцианина меди.

Фталоцианин меди относится к сложным органическим соединениям класса металлоценов. Молекула CuPc является плоской и характеризуется высокой симметрией D_{4h} . Представленные в [1, 11] результаты квантово-химических расчетов металлофталоцианинов свидетельствуют о наличии у них молекулярных орбиталей с симметрией $a_{2u}, a_{1u}, e_g, b_{2u}, b_{1u}$. Основные полосы поглощения CuPc связывают с π - π^* электронными переходами $a_{1u} \rightarrow e_g$ (Q полоса) и $a_{2u} \rightarrow e_g$ (полоса Core) между энергетическими уровнями молекулярных HOMO и LUMO орбиталей, сформированных системой сопряженных π -связей макроцикла в молекулах данного соединения [1, 11]. Максимум наиболее длинноволновой полосы электронного поглощения пленки CuPc, представленной кривой 2 на рис. 1, расположен на длине волны $\lambda \approx 700$ нм (1,77 эВ). Практически полное отсутствие флуоресценции связано с высокой скоростью интеркомбинационного перехода $S_1 \rightarrow T_1$, обусловленной сильным спин-орбитальным взаимодействием вследствие наличия тяжелого атома (меди) в центральном кольце. В ближнем ИК-диапазоне у CuPc имеется полоса люминесценции с максимумом на $\lambda \approx 1110$ нм (1,12 эВ) [12]. Согласно трактовке авторов [12, 13], данная полоса соответствует переходу из возбужденного триплетного состояния T_1 в основное S_0 .

Дифференциальные спектры гибридной наноструктуры $(Ag-CuPc)^6Ag$, приведенные на рис. 4, *a*, отражают результат воздействия лазерного импульса одновременно на обе компоненты этой системы – плазмонные наночастицы Ag и пленку CuPc. Анализ показывает, что в данном случае результат не сводится к тривиальному суммированию эффектов в каждой подсистеме, а имеет место взаимное влияние подсистем на спектрально-кинетические характеристики друг друга. Полоса просветления ППРП для гибридной наноструктуры несколько шире, чем в случае монослоя, а ее максимум смещен в длинноволновую область ближе к максимуму полосы ППРП. Это может быть обусловлено укрупнением части наиболее мелких островков в продольном направлении в процессе изготовления гетероструктуры из-за малой толщины разделительных слоев CuPc. Сливаясь в процессе формирования многослойной структуры, близко расположенные мелкие островки могут образовывать более протяженные конгломераты.

Кинетика релаксации в максимуме полосы просветления ППРП представляет собой сумму двух экспонент с характеристическими временами затухания $\tau_1 = 1,8$ пс и $\tau_2 = 40$ пс с основным вкладом первой (рис. 4, *b*). Если быстрая компонента обусловлена остыванием электронного газа за счет взаимодействия горячих электронов с поверхностью наночастиц и решеткой внутри наночастицы, то вторая компонента обычно связывается с транспортом избытка энергии наночастицы в ближайшее окружение.

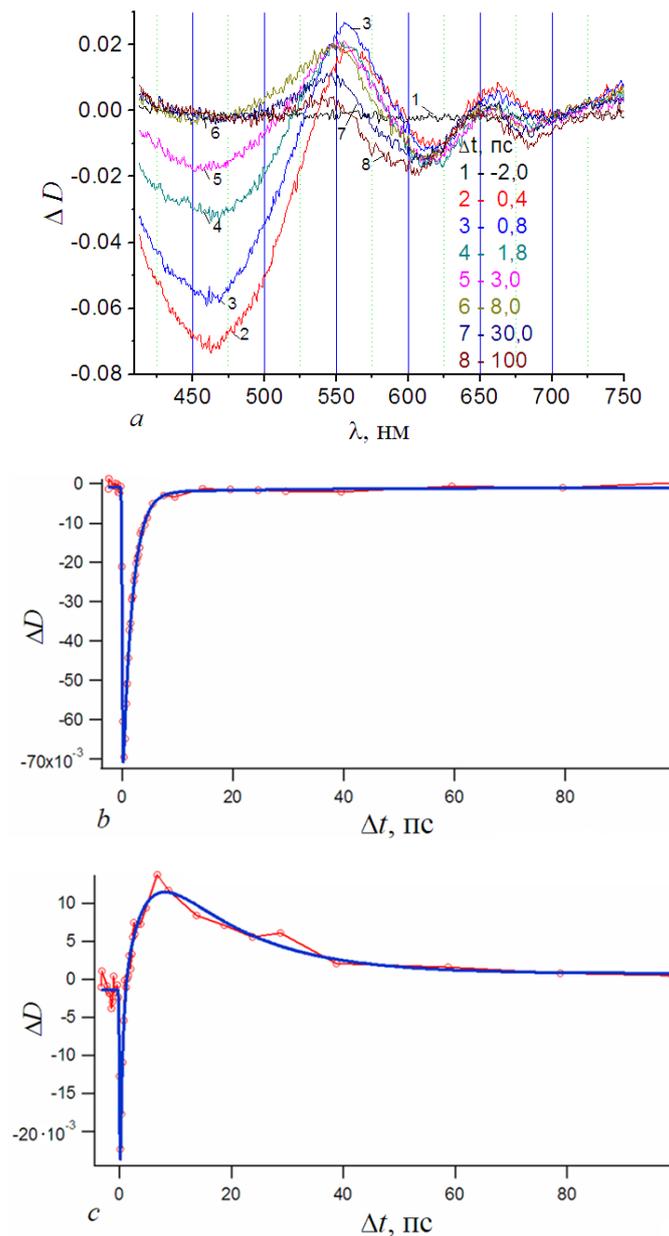


Рис. 4. Дифференциальные спектры поглощения системы $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$, $E_{\text{возб}} = 5$ мкДж, $\lambda_{\text{возб}} = 395$ нм (a). Кинетики релаксации в максимуме полосы просветления ППРП ($\lambda = 450$ нм) (b) и наведенного поглощения ($\lambda = 525$ нм) (c) структуры $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$

Fig. 4. The differential absorption spectra of the system $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$. $E_{\text{exc}} = 5$ μJ , $\lambda_{\text{exc}} = 395$ nm (a). The kinetics of relaxation at the maximum of the bleaching band SPRA ($\lambda = 450$ nm) (b) and induced absorption ($\lambda = 525$ nm) (c) of the structure $(\text{Ag-CuPc})^6\text{Ag}$

Основное время релаксации (1,8 пс) заметно короче, чем в случае монослоя, что можно объяснить все меньшей долей возбуждения, приходящейся на каждый из последующих слоев в гибридной многослойной структуре. В случае монослоя, при используемых интенсивностях возбуждения, имело место насыщение регистрируемого сигнала, и вследствие этого происходило увеличение измеряемого времени релаксации. Кроме того, как отмечалось выше, в процессе изготовления многослойной структуры возможно изменение размеров плазмонных наночастиц. Таким образом, влияние CuPc на плазмонную подсистему ограничивается в основном разделением монослоев Ag и поглощением части возбуждения по мере распространения излучения в структуре.

Максимум полосы наведенного синглет-синглетного поглощения при $\lambda = 525$ нм фталоцианина меди в гибридной структуре перекрывается краем полосы просветления ППРП. Поэтому кинетика наведенной оптической плотности в данном случае, в отличие от монослоя CuPc (см. рис. 3, с), имеет сложную форму и на временах в несколько пикосекунд определяется в основном быстрой релаксацией более интенсивной полосы просветления ППРП. На временных задержках более 10 пс регистрируется уже чистое затухание полосы наведенного $S_1 \rightarrow S_n$ поглощения CuPc с характеристическим временем ~ 15 пс (рис. 4, с), что заметно короче аналогичного времени (50 пс) для чистой пленки фталоцианина меди толщиной 40 нм, которое мы связываем с процессом интерконверсии в органической пленке. В полосе просветления органической подсистемы гибридной наноструктуры наблюдается сложная кинетика изменения наведенной оптической плотности, связанная, как уже говорилось выше, с наложением затухающего $S_1 \rightarrow S_n$ поглощения, образующегося $T_1 \rightarrow T_n$ поглощения и остающегося долгоживущего просветления.

Заклучение. Таким образом, с использованием фемтосекундной абсорбционной спектроскопии установлено, что регистрируемая динамика нестационарных спектров поглощения гибридной наноструктуры (Ag–CuPc)⁶Ag на основе островковых пленок серебра и фталоцианина меди отражает существующее взаимное влияние плазмонной и органической подсистем на характеристики электронных состояний друг друга. Время релаксации основной компоненты в кинетике релаксации наведенного поглощения на длине волны $\lambda = 525$ нм ($\tau \sim 15$ пс) для органической подсистемы CuPc суммарной толщиной $l \sim 40$ нм в гибридной структуре заметно короче времени релаксации ($\tau \sim 50$ пс) аналогичной компоненты для чистой пленки фталоцианина меди такой же толщины. Предполагается, что присутствие наночастиц серебра в гибридной структуре (Ag–CuPc)⁶Ag, характеризующихся наличием сильного локального поля вблизи их поверхности, влияет на вероятность интеркомбинационных переходов в органической подсистеме, ускоряя переход молекул CuPc в долгоживущее триплетное состояние. Получен восстановленный спектр триплет-триплетного поглощения фталоцианина меди в спектральной области 470–750 нм.

Благодарности. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф19ВА-003).

Acknowledgements. The work was partially supported by the Belarusian Republican Foundation for Basic Research (grant no. Ф19ВА-003).

Список использованных источников

1. Leznoff, C. C. Phthalocyanines: properties and applications / C. C. Leznoff, A. B. P. Lever. – Weinheim: VCH, 1996. – Vol. 4. – 536 p.
2. Hohnholz, D. Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices / D. Hohnholz, S. Steinbrecherb, M. Hanack // J. Mol. Struct. – 2000. – Vol. 521, № 1/3. – P. 231–237. [https://doi.org/10.1016/s0022-2860\(99\)00438-x](https://doi.org/10.1016/s0022-2860(99)00438-x)
3. 4.2% efficient organic photovoltaic cells with low series resistances / J. Xue [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2004. – Vol. 84, № 16. – P. 3013–3015. <https://doi.org/10.1063/1.1713036>
4. Van Flassen, E. Explanation of the low oxygen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors / E. Van Flassen, H. Kerp // Sens. Actuators B: Chemical. – 2003. – Vol. 88, № 3. – P. 329–333. [https://doi.org/10.1016/s0925-4005\(02\)00379-9](https://doi.org/10.1016/s0925-4005(02)00379-9)
5. Surface-enhanced non-linear Raman scattering at the single-molecule level / K. Kneipp [et al.] // Chem. Phys. – 1999. – Vol. 247, № 1. – P. 155–162. [https://doi.org/10.1016/s0301-0104\(99\)00165-2](https://doi.org/10.1016/s0301-0104(99)00165-2)
6. Optimization of nanoparticle size for plasmonic enhancement of fluorescence / O. Stranik [et al.] // Plasmonics. – 2007. – Vol. 2, № 1. – P. 15–22. <https://doi.org/10.1007/s11468-006-9020-9>
7. Замковец, А. Д. Влияние эффектов ближнего поля на спектральные свойства слоистых нанокомпозитов серебро-фталоцианина меди / А. Д. Замковец, А. Н. Понявина // Журн. приклад. спектроскопии. – 2012. – Т. 79, № 6. – С. 907–912.
8. Plasmon-Related Modification of Spectral Kinetic Properties of Copper Phthalocyanine Thin Films in the Presence of Silver Nanoparticles / O. V. Buganov [et al.] // J. App. Spectrosc. – 2014. – Vol. 81, № 1. – P. 92–96. <https://doi.org/10.1007/s10812-014-9892-y>
9. Charge transfer process determines ultrafast excited state deactivation of thioflavin T in low-viscosity solvents / V. I. Stsiapura [et al.] // J. Phys. Chem. A. – 2010. – Vol. 114, № 32. – P. 8345–8350. <https://doi.org/10.1021/jp105186z>
10. Sergeeva, N. N. Photochemical Transformations Involving Porphyrins and Phthalocyanines / N. N. Sergeeva, M. O. Senge // CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology. – 2012. – P. 831–879. <https://doi.org/10.1201/b12252-35>
11. Mack, J. Assignment of the optical spectra of metal phthalocyanines through spectral band deconvolution analysis and ZINDO calculations / J. Mack, M. J. Stillman // Coord. Chem. Rev. – 2001. – Vol. 219, № 221. – P. 993–1032. [https://doi.org/10.1016/s0010-8545\(01\)00394-0](https://doi.org/10.1016/s0010-8545(01)00394-0)

12. Влияние структуры молекул фталоцианинов меди на характер их упорядочения в тонких пленках, спектры фотолюминесценции и поглощения / В. Л. Берковиц [и др.] // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49, № 2. – С. 262–266.
13. Vincett, P. S. Phosphorescence and Fluorescence of Phthalocyanines / P. S. Vincett, E. M. Voigt, K. E. Rieckhoff // J. Chem. Phys. – 1971. – Vol. 55, № 8. – P. 4131–4140. <https://doi.org/10.1063/1.1676714>

References

1. Leznoff C. C., Lever A. B. P. *Phthalocyanines: properties and applications. Vol. 4*. Weinheim, VCH, 1996. 536 p.
2. Hohnholz D., Steinbrecher S., Hanack M. Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices. *Journal of Molecular Structure*, 2000, vol. 521, no. 1–3, pp. 231–237. [https://doi.org/10.1016/s0022-2860\(99\)00438-x](https://doi.org/10.1016/s0022-2860(99)00438-x)
3. Xue J., Uchida S., Rand B. P., Forrest S. R. 4.2% efficient organic photovoltaic cells with low series resistances. *Applied Physics Letters*, 2004, vol. 84, no. 16, pp. 3013–3015. <https://doi.org/10.1063/1.1713036>
4. Van Flassen E., Kerp H. Explanation of the low oxygen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2003, vol. 88, no. 3, pp. 329–333. [https://doi.org/10.1016/s0925-4005\(02\)00379-9](https://doi.org/10.1016/s0925-4005(02)00379-9)
5. Kneipp K., Kneipp H., Itzkan I., Dasari R. R., Feld M. S. Surface-enhanced non-linear Raman scattering at the single-molecule level. *Chemical Physics*, 1999, vol. 247, no. 1, pp. 155–162. [https://doi.org/10.1016/s0301-0104\(99\)00165-2](https://doi.org/10.1016/s0301-0104(99)00165-2)
6. Stranik O., Nooney R., McDonagh C., MacCraith B. D. Optimization of nanoparticle size for plasmonic enhancement of fluorescence. *Plasmonics*, 2007, vol. 2, no. 1, pp. 15–22. <https://doi.org/10.1007/s11468-006-9020-9>
7. Zamkovets A. D., Ponyavina A. N. Near-field effects on spectral properties of layered silver–copper phthalocyanine nanocomposites. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2012, vol. 79, no. 6, pp. 908–913. <https://doi.org/10.1007/s10812-013-9693-8>
8. Buganov O. V., Zamkovets A. D., Ponyavina A. N., Tikhomirov S. A. Plasmon-Related Modification of Spectral Kinetic Properties of Copper Phthalocyanine Thin Films in the Presence of Silver Nanoparticles. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2014, vol. 81, no. 1, pp. 92–96. <https://doi.org/10.1007/s10812-014-9892-y>
9. Stsiapura V. I., Maskevich A. A., Tikhomirov S. A., Buganov O. V. Charge transfer process determines ultrafast excited state deactivation of thioflavin T in low-viscosity solvents. *Journal of Physical Chemistry A*, 2010, vol. 114, no. 32, pp. 8345–8350. <https://doi.org/10.1021/jp105186z>
10. Sergeeva N. N., Senge M. O. Photochemical Transformations Involving Porphyrins and Phthalocyanines. *CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology*, 2012, pp. 831–879. <https://doi.org/10.1201/b12252-35>
11. Mack J., Stillman M. J. Assignment of the optical spectra of metal phthalocyanines through spectral band deconvolution analysis and ZINDO calculations. *Coordination Chemistry Reviews*, 2001, vol. 219, no. 221, pp. 993–1032. [https://doi.org/10.1016/s0010-8545\(01\)00394-0](https://doi.org/10.1016/s0010-8545(01)00394-0)
12. Berkovits V. L., Ziminov A. V., Kazanskiy A. G., Kolos'ko A. G., Ramsh S. M., Terukov E. I., Fenukhin A. V., Ulin V. P., Yurre T. A., Kleider J. P. Influence of the molecular structure of copper phthalocyanines on their ordering in thin films and photoluminescence and absorption spectra. *Physics of the Solid State*, 2007, vol. 49, no. 2, pp. 272–277. <https://doi.org/10.1134/s1063783407020151>
13. Vincett P. S., Voigt E. M., Rieckhoff K. E. Phosphorescence and Fluorescence of Phthalocyanines. *The Journal of Chemical Physics*, 1971, vol. 55, no. 8, pp. 4131–4140. <https://doi.org/10.1063/1.1676714>

Информация об авторах

Барбарчик Екатерина Александровна – младший научный сотрудник Центра фотоники атомных и молекулярных структур, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: e.barbarchyk@ifanbel.bas-net.by

Буганов Олег Васильевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Центра фотоники атомных и молекулярных структур, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: o.buganov@ifanbel.bas-net

Замковец Анатолий Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Центра фотоники атомных и молекулярных структур, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: a.zamkovets@dragon.bas-net.by

Тихомиров Сергей Александрович – член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, доктор физико-математических наук, главный научный

Information about the authors

Katsiaryna A. Barbarchyk – Junior Researcher of the Center of Photonics of Atoms and Molecules Structures, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: e.barbarchyk@ifanbel.bas-net.by

Oleg V. Buganov – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher of the Center of Photonics of Atoms and Molecules Structures, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: o.buganov@ifanbel.bas-net

Anatoly D. Zamkovets – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher of the Center of Photonics of Atoms and Molecules Structures, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a.zamkovets@dragon.bas-net.by

Sergey A. Tikhomirov – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, Scientific Head of the Center of Photonics of Atoms and Molecules Structures, B. I. Stepanov

сотрудник Центра фотоники атомных и молекулярных структур, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: s.tik@dragon.bas-net.by

Фан Вьет Тип – кандидат физико-математических наук, руководитель исследовательской группы, Институт физики Вьетнамской академии наук и технологий (10, Dao Str., Cong Vi, Da Dinh, Hanoi, Vietnam).

Фам Хон Мынь – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, заместитель директора центра квантовой оптики, Институт физики Вьетнамской академии наук и технологий (10, Dao Tan Str., Cong Vi, Da Dinh, Hanoi, Vietnam). E-mail: phminh@iop.vast.ac.vn

Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68-2, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: s.tik@dragon.bas-net.by

Phung Viet Tiep – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Research Group, Institute of Physics, Vietnam Academy of Science and Technology (10, Dao Tan Str., Cong Vi, Da Dinh, Hanoi, Vietnam).

Pham Hong Minh – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of Laboratory, Vice Director of Center for Quantum electronics, Institute of Physics, Vietnam Academy of Science and Technology (10, Dao Tan Str., Cong Vi, Da Dinh, Hanoi, Vietnam). E-mail: phminh@iop.vast.ac.vn

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 621.315.592

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-480-487>

Поступила в редакцию 03.09.2020

Received 03.09.2020

Е. А. Толкачева¹, В. П. Маркевич², Л. И. Мурин¹¹Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению,
Минск, Беларусь²Университет г. Манчестер, Манчестер, Великобритания**ЛОКАЛЬНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ ВАКАНСИОННО-КИСЛОРОДНЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ**

Аннотация. Изотопный состав природного кремния (²⁸Si (92,23 %), ²⁹Si (4,68 %) и ³⁰Si (3,09 %)) оказывает заметное влияние на форму полос ИК-поглощения, обусловленных примесными атомами кислорода. В настоящей работе предпринята попытка определить положение локальных колебательных мод (ЛКМ), обусловленных квазимолекулами ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁹Si и ²⁸Si-¹⁶O_S-³⁰Si (O_S – атом кислорода в узле решетки), для спектров поглощения, измеренных при комнатной температуре. Проведена оценка изотопических сдвигов соответствующих мод путем подгонки формы полосы поглощения для комплекса вакансия–кислород (А-центр) в облученных кристаллах Si. Изотопические сдвиги ЛКМ равны $2,2 \pm 0,25 \text{ см}^{-1}$ для ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁹Si и $4,3 \pm 0,9 \text{ см}^{-1}$ для ²⁸Si-¹⁶O_S-³⁰Si по отношению к полосе ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁸Si, а полуширина полосы поглощения А-центра (²⁸Si-¹⁶O_S-²⁸Si) составляет $5,3 \pm 0,25 \text{ см}^{-1}$. Методом ИК-спектроскопии установлено, что в температурном интервале отжига дивакансий (200–275 °С) в облученных кислородсодержащих кристаллах кремния имеет место формирование двух полос поглощения с максимумами у 825,8 и 839,2 см⁻¹. Комплексу дивакансия–кислород V₂O, образуемому путем захвата подвижных V₂ междоузельными атомами кислорода O_i, приписана полоса у 825,8 см⁻¹. Относительная интенсивность полосы у 839,2 см⁻¹ существенно увеличивается в образцах, облученных нейтронами, по сравнению с образцами, облученными электронами. Сделано заключение, что эта полоса связана с комплексом тривакансия–кислород V₃O, образуемым путем захвата подвижных V₃ атомами O_i.

Ключевые слова: локальные колебательные моды, кремний, ИК-поглощение, изотопический сдвиг, изотопный состав

Для цитирования. Толкачева, Е. А. Локальные колебательные моды вакансионно-кислородных комплексов в кристаллическом кремнии при комнатной температуре / Е. А. Толкачева, В. П. Маркевич, Л. И. Мурин // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 480–487. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-480-487>

Ekaterina A. Tolkacheva¹, Vladimir P. Markevich², Leonid I. Murin¹¹Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus²The University of Manchester, Manchester, Great Britain**LOCAL VIBRATIONAL MODES OF VACANCY-OXYGEN-RELATED COMPLEXES AT ROOM TEMPERATURE**

Abstract. The isotopic content of natural silicon (²⁸Si (92.23 %), ²⁹Si (4.68 %) and ³⁰Si (3.09 %)) affects noticeably the shape of IR absorption bands related to the oxygen impurity atoms. In the present work an attempt is undertaken to determine the positions of local vibrational modes (LVMs), related to quasimolecules ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁹Si and ²⁸Si-¹⁶O_S-³⁰Si (O_S – substitutional oxygen atom), for the absorption spectra measured at room temperature. An estimation of the isotopic shifts of corresponding modes is done by fitting the shape of the experimentally measured absorption band related to the vacancy–oxygen center in irradiated Si crystals. The LVM isotope shifts are found to be equal $2,2 \pm 0,25 \text{ cm}^{-1}$ for ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁹Si and $4,3 \pm 0,9 \text{ cm}^{-1}$ for ²⁸Si-¹⁶O_S-³⁰Si in relation to the basic band due to ²⁸Si-¹⁶O_S-²⁸Si, and the full width at half maximum of the A-center absorption band (²⁸Si-¹⁶O_S-²⁸Si) is $5,3 \pm 0,25 \text{ cm}^{-1}$. By means of infrared absorption spectroscopy a clear correlation between the disappearance of the divacancy (V₂) in the temperature range 200–275 °C and appearance of two absorption bands with their maxima at 825.8 and 839.2 cm⁻¹ in irradiated oxygen-rich Si crystals is found. The band positioned at 825.8 cm⁻¹ is assigned to a divacancy-oxygen defect V₂O formed via an interaction of mobile V₂ with interstitial oxygen (O_i) atoms. The 839.2 cm⁻¹ band is much more pronounced in neutron irradiated samples as compared to samples irradiated with electrons. We argue that it is related to a trivacancy–oxygen defect (V₃O) formed via an interaction of mobile V₃ with O_i atoms.

Keywords: local vibrational mode; silicon; infra-red absorption; isotopic shift; isotopic content

For citation. Tolkacheva E. A., Markevich V. P., Murin L. I. Local vibrational modes of vacancy-oxygen-related complexes at room temperature. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 480–487 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-480-487>

Введение. Наиболее важной технологической примесью (после основных легирующих) в кремнии является кислород [1]. Высокотемпературные обработки, а также облучение высокоэнергетическими частицами кислородсодержащих кристаллов Si и их последующий отжиг приводят к образованию различного рода электрически и оптически активных центров, включающих в свой состав примесные атомы кислорода [1–4]. Из них особый интерес представляют вакансионно-кислородные комплексы. Благодаря наличию глубоких уровней и высокой термической стабильности такие комплексы могут служить эффективными центрами рекомбинации неосновных носителей заряда и следует ожидать их применения в радиационной технологии изготовления кремниевых быстродействующих приборов [5]. Кроме того, предполагается [4], что некоторые из этих комплексов являются центрами зарождения кислородных преципитатов, формирование которых используется в современной технологии кремниевых приборов и интегральных микросхем для геттерирования нежелательных примесей (Cu, Fe и т. д.). В связи с этим уже в течение ряда лет интенсивно изучаются механизмы формирования и свойства кислородсодержащих центров в кремнии.

Одной из наиболее успешно применяющихся методик исследования кислородсодержащих центров в кремнии является спектроскопия локальных колебательных мод (ЛКМ) [1–4, 6, 7]. В частности, методом ИК-поглощения была проведена идентификация кислородных димеров и ряда вакансионно-кислородных комплексов VO_n ($n \geq 1$) [2, 3]. В то же время имеющиеся в литературе данные о локальных колебательных модах так называемых мультивакансионных кислородсодержащих комплексов V_nO ($n \geq 2$) весьма неоднозначны [3, 6, 8]. В первую очередь это связано с тем, что комплексы V_nO ($n \geq 2$) содержат такую же структурную единицу Si-O-Si, как и комплекс вакансия–кислород (VO или A-центр) и частоты валентных колебаний кислорода очень близки для всех центров. На эксперименте это проявляется в том, что даже в спектрах, измеренных при низкой температуре (НТ), имеет место перекрытие полос поглощения, обусловленных разными комплексами [6]. При этом полоса поглощения, обусловленная VO, как правило, доминирует. Только тщательный анализ формы полос, обусловленных V_2O и V_3O , с учетом изотопного состава кристаллов Si (природный кремний состоит из изотопов ^{28}Si (92,23 %), ^{29}Si (4,68 %) и ^{30}Si (3,09 %) [7]), позволил провести идентификацию ЛКМ соответствующих центров [6].

Ситуация является еще более сложной при интерпретации спектров поглощения, измеренных при комнатной температуре (КТ). В этом случае полуширины полос, обусловленных атомами кислорода, находящимися в вакансии (дивакансии, тривакансии), в несколько раз превышают как аналогичные величины, полученные из анализа спектров, измеренных при низкой температуре, так и значения изотопических сдвигов полос комплексов V_nO , когда один из атомов ^{28}Si в структуре Si-O-Si заменен атомами ^{29}Si или ^{30}Si , либо оба атома ^{28}Si заменены изотопами (см. далее). Как результат, в спектрах поглощения, измеренных при комнатной температуре, имеет место большее перекрытие близкорасположенных полос поглощения, что в свою очередь может снизить достоверность и однозначность результатов анализа (подгонки) соответствующих спектров.

Несмотря на очевидные преимущества ИК-измерений колебательных спектров при низкой температуре, в ряде случаев получить нужную информацию из таких измерений не представляется возможным. Это относится в первую очередь к образцам Si, в НТ спектрах которых наблюдается сильное поглощение, обусловленное электронными переходами на водородо- и гелиоподобных центрах [9]. Кроме того, в ряде случаев у исследователей просто отсутствует оборудование, необходимое для проведения НТ измерений спектров ИК-поглощения. В связи с вышеизложенным значительный интерес представляет разработка методики детального анализа спектров ИК-поглощения, измеренных при комнатной температуре, для облученных и отожженных кристаллов кремния. Очевидно, что для анализа сложных спектров, обусловленных суперпозицией ЛКМ вакансионно-кислородных комплексов в природном кремнии, требуется знание величин

кремниевых изотопических сдвигов для валентного колебания комплекса VO (А-центра) при КТ. Определение значений таких сдвигов и являлось одной из целей настоящей работы. Полученные данные были использованы затем для идентификации ЛКМ комплексов V_2O и V_3O при комнатной температуре.

Методика исследований. Исследовались кристаллы кремния *n*-типа, полученные методом Чохральского (Cz–Si). Концентрации O_i ($[O_i] = (8–11) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) и углерода замещения ($[C_s] = (0,5–7) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$) определялись по результатам измерений интенсивности хорошо известных полос поглощения 1107 и 605 см^{-1} с использованием калибровочных коэффициентов $3,14 \cdot 10^{17}$ и $0,94 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ для кислорода и углерода соответственно [2]. Образцы полировались с двух сторон и имели размеры $10 \times 6 \times 3$ или $10 \times 6 \times 5 \text{ мм}^3$.

Облучение высокоэнергетическими протонами ($E = 24 \text{ ГэВ}$), быстрыми электронами ($E = 2, 6$ и 10 МэВ) и нейтронами проводилось при комнатной температуре ($\leq 350 \text{ К}$) различными дозами от $1 \cdot 10^{16}$ до $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$, и образцы обычно хранились при комнатной температуре в течение нескольких недель перед измерениями. Образцы были подвергнуты 30-минутному изохронному отжигу в диапазоне $75–400 \text{ }^\circ\text{C}$ с шагом $25 \text{ }^\circ\text{C}$. Спектры ИК-поглощения измерялись на Фурье-спектрометре Bruker 113v при комнатной температуре. Спектральное разрешение составляло $1,0 \text{ см}^{-1}$.

Результаты и их обсуждение. Мы попытались оценить изотопические сдвиги соответствующих мод полуэмпирическим путем, т. е. путем подгонки формы полосы поглощения VO, используя функции Лоренца с фиксированными соотношениями амплитуд, соответствующими относительным концентрациям различных изотопных комбинаций Si-O-Si в природном кремнии, аналогично тому, как это было сделано в работе [7]. При оценке изотопических сдвигов соответствующих мод полуэмпирическим путем относительная интенсивность для основной полосы поглощения $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_s-^{28}\text{Si}$ принималась равной 1, суммарная интенсивность полос поглощения для изотопных модификаций $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_s-^{30}\text{Si}$ и $^{29}\text{Si}-^{16}\text{O}_s-^{29}\text{Si}$ составила 0,0696, для $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_s-^{29}\text{Si}$ – 0,1015. Подгоночными параметрами являлись положения локальных колебательных мод и значения полуширин соответствующих полос, которые задавались одинаковыми для всех изотопных комбинаций. Было проанализировано большое количество экспериментально измеренных спектров поглощения (в качестве примера на рис. 1 показан один из таких спектров). Характеристики исследуемых образцов представлены в табл. 1, полученные значения положения основной полосы А-центра (комбинация $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}_s-^{28}\text{Si}$), изотопических сдвигов и полуширины данной полосы приведены в табл. 2.

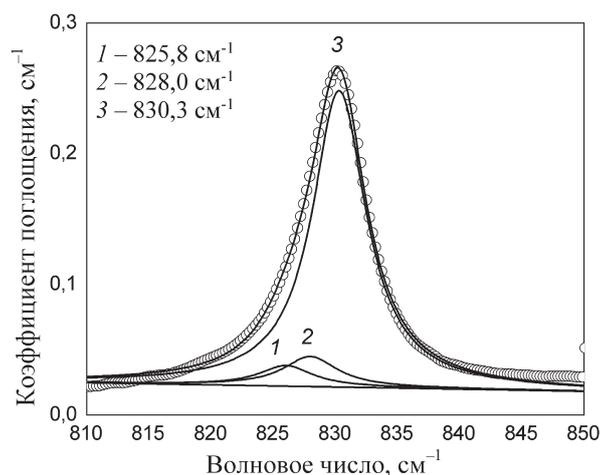


Рис. 1. Фрагмент спектра поглощения, измеренного при комнатной температуре для образца Cz–Si ($[O_i] = 1,3 \cdot 10^{18}$, $[C_s] = 5 \cdot 10^{15}$, $[P] = 8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$), облученного электронами ($E = 10 \text{ МэВ}$, $F = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$). Сплошные линии – подгонка с использованием функции Лоренца после коррекции базовой линии

Fig. 1. Fragment of the absorption spectrum measured at room temperature for a Cz–Si sample Cz–Si ($[O_i] = 1,3 \cdot 10^{18}$, $[C_s] = 5 \cdot 10^{15}$, $[P] = 8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) irradiated with electrons ($E = 10 \text{ МэВ}$, $F = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$). Solid lines – Lorentz fit after baseline correction

Полученные средние значения изотопических сдвигов локальных колебательных мод оказались равными $2,21 \text{ см}^{-1}$ для $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}-^{29}\text{Si}$ и $4,29 \text{ см}^{-1}$ для $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}-^{30}\text{Si}$, что заметно превышает соответствующие величины ($1,51$ и $2,92 \text{ см}^{-1}$), полученные из анализа низкотемпературных спектров. В данный момент причины таких отличий не совсем понятны. Следует отметить, что максимум поглощения для основной комбинации $^{28}\text{Si}-^{16}\text{O}-^{28}\text{Si}$ при комнатной температуре расположен у $830,3 \text{ см}^{-1}$, т. е. смещен на $5,5 \text{ см}^{-1}$ в область более низких частот от своего положения у $835,8 \text{ см}^{-1}$ при низкой температуре. При этом полуширина соответствующей полосы выросла от $2,34 \text{ см}^{-1}$ [7] при НТ до $5,31 \text{ см}^{-1}$ при КТ.

Таблица 1. Характеристики исследуемых образцов

Table 1. Characteristics of the studied samples

Материал	Тип облучения, доза, см^{-2}	Энергия облучения	Отжиг, $^{\circ}\text{C}$	Концентрация легирующей примеси, см^{-3}	Концентрации междоузельного кислорода $[\text{O}_i]$, см^{-3}	Концентрации углерода замещения $[\text{C}_s]$, см^{-3}
WL-6	Электроны, $3 \cdot 10^{17}$	$10 \cdot \text{МэВ}$	100	$[\text{P}] = 8 \cdot 10^{13}$	$1,3 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{15}$
		$10 \cdot \text{МэВ}$	150	$[\text{P}] = 8 \cdot 10^{13}$	$1,3 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{15}$
3-J4	Протоны, $1 \cdot 10^{16}$	$24 \cdot \text{ГэВ}$	–	$[\text{P}] = 1 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{18}$	$\sim 10^{15}$
Val-2-1	Электроны, $3 \cdot 10^{17}$	$10 \cdot \text{МэВ}$	–	$[\text{P}] = 1 \cdot 10^{14}$	$8,3 \cdot 10^{14}$	$7 \cdot 10^{16}$
		$10 \cdot \text{МэВ}$	100	$[\text{P}] = 1 \cdot 10^{14}$	$8,3 \cdot 10^{14}$	$7 \cdot 10^{16}$
		$10 \cdot \text{МэВ}$	150	$[\text{P}] = 1 \cdot 10^{14}$	$8,3 \cdot 10^{14}$	$7 \cdot 10^{16}$
W-44	Электроны, $1 \cdot 10^{18}$	$2 \cdot \text{МэВ}$	–	$[\text{P}] = 8 \cdot 10^{13}$	$1,2 \cdot 10^{18}$	$\sim 5 \cdot 10^{15}$
W027	Электроны, $1 \cdot 10^{17}$	$2 \cdot \text{МэВ}$	–	$[\text{P}] = 8 \cdot 10^{13}$	$1,2 \cdot 10^{18}$	$\leq 1 \cdot 10^{15}$
1-I4	Протоны, $1 \cdot 10^{16}$	$24 \cdot \text{ГэВ}$	–	$[\text{P}] = 1 \cdot 10^{14}$	$9 \cdot 10^{17}$	$7 \cdot 10^{16}$

Таблица 2. Характеристики колебательных полос для изотопических модификаций квазимолекулы $\text{Si}-^{16}\text{O}_s\text{-Si}$ для центра VO, определенные путем подгонки лоренцианами (комнатные температуры)

Table 2. Characteristics of vibrational bands for isotopic modifications of the quasimolecule $\text{Si}-^{16}\text{O}_s\text{-Si}$ for the VO center, determined by Lorentzians fitting (room temperatures)

Материал	Отжиг, $^{\circ}\text{C}$	$^{28}\text{Si}-\text{O}-^{28}\text{Si}$ Положение, см^{-1}	$^{29}\text{Si}-\text{O}-^{28}\text{Si}$ Сдвиг, см^{-1}	$^{30}\text{Si}-\text{O}-^{28}\text{Si}$ Сдвиг, см^{-1}	Полуширина, см^{-1}
WL-6	–	830,29	2,3	4,53	5,27
	150	830,29	2,27	4,48	5,30
3-J4	–	830,34	1,99	3,83	5,50
Val-2-1	–	830,29	2,09	4,17	5,33
	100	830,31	2,23	4,34	5,30
	150	830,30	2,35	4,59	5,36
W-44	–	830,32	2,4	4,32	5,26
W027	–	830,3	2,07	4,05	5,18
1-I4	–	830,35	2,47	3,39	5,04
Среднее значение		830,3	2,21	4,29	5,31

Полученные значения основных оптических характеристик А-центров позволили провести идентификацию ЛКМ комплексов V_2O и V_3O при комнатной температуре.

Локальные колебательные моды комплексов дивакансия–кислород и тривакансия–кислород при комнатной температуре. Очевидно, что в процессе облучения при $T \sim 300 \text{ K}$ дефекты V_nO в кремнии могут возникнуть путем последовательного захвата подвижных вакансий ловушками O_i , VO , V_2O и так далее, т. е. через реакции $\text{V} + \text{O}_i \Rightarrow \text{VO}$, $\text{V} + \text{VO} \Rightarrow \text{V}_2\text{O}$, $\text{V} + \text{V}_n\text{O} \Rightarrow \text{V}_{n+1}\text{O}$. Однако в Cz-Si , где концентрация кислорода $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, генерация V_nO ($n \geq 2$) может быть эффективной только при очень больших дозах облучения, когда концентрация VO сопоставима с концентрацией O_i .

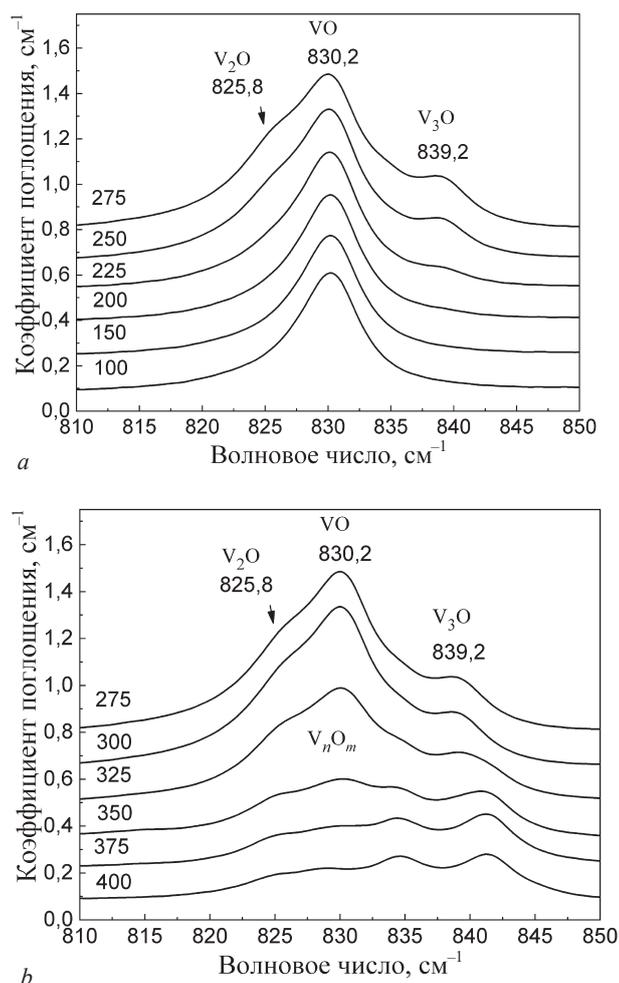


Рис. 2. Развитие спектра поглощения, измеренного при $T = 300$ К для образца Cz-Si ($[O_i] = 8,3 \cdot 10^{17}$, $[C_s] = 7 \cdot 10^{16}$, $[P] = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), облученного нейтронами ($F = 7,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), в процессе изохронного отжига 100–275 °C (a); развитие спектров поглощения, измеренных при $T = 300$ К для образца Cz-Si ($[O_i] = 8,3 \cdot 10^{17}$, $[C_s] = 7 \cdot 10^{16}$, $[P] = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), облученного нейтронами ($F = 7,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), в процессе изохронного отжига 275–400 °C (b)

Fig. 2. Development of the absorption spectrum measured at $T = 300$ K for the sample Cz-Si ($[O_i] = 8.3 \cdot 10^{17}$, $[C_s] = 7 \cdot 10^{16}$, $[P] = 1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), irradiated neutrons ($F = 7.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$), during isochronous annealing 100–275 °C (a); development of absorption spectra measured at $T = 300$ K for the sample Cz-Si ($[O_i] = 8.3 \cdot 10^{17}$, $[C_s] = 7 \cdot 10^{16}$, $[P] = 1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), irradiated neutrons ($F = 7.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$), during isochronous annealing 275–400 °C

При относительно небольших дозах, когда концентрация радиационных дефектов намного ниже концентрации O_i , образование V_2O незначительно даже в случае облучения нейтронами, и основное формирование комплексов V_nO ($n \geq 2$) имеет место в процессе последующих отжигов облученных кристаллов кремния.

На рис. 2 показано развитие спектров поглощения в интервале волновых чисел 810–850 см^{-1} , обусловленных комплексами V_nO , в процессе изохронного отжига образца, облученного быстрыми нейтронами. В данном интервале волновых чисел наблюдается формирование и последующий отжиг ряда полос, обусловленных комплексами V_nO_m . Форма полос была проанализирована при помощи подгонки с учетом влияния изотопов кремния ^{29}Si и ^{30}Si . При этом значения изотопических сдвигов и величины полуширин для всех центров задавались равными таковым, определенным нами для комплексов VO. После облучения в интервале волновых чисел 810–850 см^{-1} наблюдается только полоса А-центра (рис. 2, a). При температурах отжига выше 200 °C появляются дополнительные пики, связанные с вакансионно-кислородными комплексами V_nO , $n \geq 2$. Последующий отжиг (рис. 2, b) при температурах выше 300 °C приводит к снижению

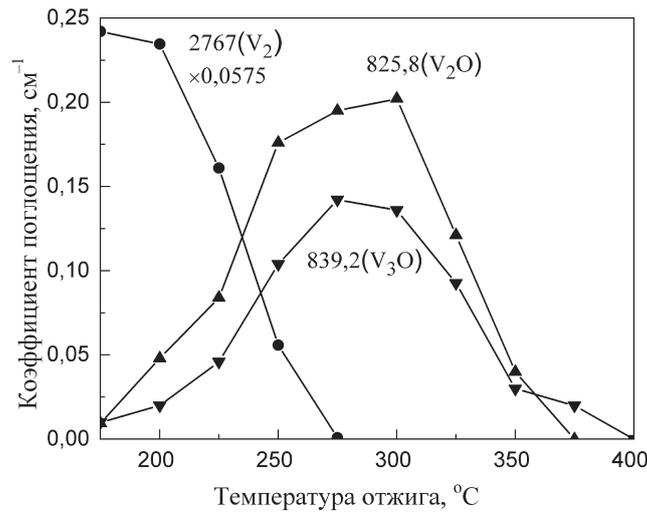


Рис. 3. Зависимости амплитуд полос поглощения 2767; 833,4 и 842,4 см⁻¹, обусловленных комплексами V₂, V₂O и V₃O, от температуры изохронного отжига

Fig. 3. Dependences of the amplitudes of the absorption bands at 2767, 833.4, and 842.4 cm⁻¹, caused by complexes V₂, V₂O and V₃O, on the temperature of isochronous annealing

интенсивности соответствующих пиков и появлению ряда новых, но уже менее интенсивных пиков, обусловленных, вероятнее всего, комплексами V_nO_m (n, m ≥ 2).

Дивакансии в кремнии подвижны при температурах выше 200 °C и в кристаллах Cz–Si междуузельный кислород является основной ловушкой подвижных V₂ [6], т. е. имеет место преобразование V₂ в V₂O через реакцию V₂ + O_i ⇒ V₂O. Отметим, что возможность такой реакции была недавно подтверждена в детальных исследованиях отжига дивакансий и тривакансий методом DLTS [10]. Появление новых дефектов после исчезновения V₂ также ясно наблюдалось в наших исследованиях методом ИК-поглощения.

Отжиг дивакансии в образцах Cz–Si сопровождается появлением новых полос поглощения. Самые интенсивные из них расположены у 825,8 и 839,2 см⁻¹. Исследования изохронного отжига показали, что не только процессы их формирования, но также и кинетика отжига очень подобны. Полосы 825,8 и 839,2 см⁻¹ исчезают одновременно после отжига в температурном диапазоне 300–375 °C. На рис. 3 представлены зависимости амплитуд соответствующих полос от температуры изохронного отжига.

Можно предположить, что обе полосы связаны с одним и тем же дефектом, а именно V₂O, находящимся в различных конфигурациях. Однако есть факты, которые не подтверждают такое предположение. Было обнаружено, что отношение интенсивностей этих полос различно в образцах, облученных быстрыми электронами и нейтронами, т. е. зависит от вида облучения (энергии и массы частиц). Полоса 839,2 см⁻¹ является намного более интенсивной при нейтронном облучении. Это свидетельствует о том, что она возникает из более сложного дефекта, чем полоса 825,8 см⁻¹. Возможный кандидат – дефект V₃O. Вероятнее всего, тривакансии V₃, образующиеся главным образом как первичные дефекты, обладают такой же миграционной способностью, как и V₂, и V₃O может образовываться через реакцию V₃ + O_i ⇒ V₃O. Такое заключение хорошо согласуется с недавними результатами, полученными методом DLTS по отжигу тривакансий и их трансформации в комплексы V₃O [10]. Эти данные также хорошо согласуются с данными для комплексов V₂O и V₃O, полученными из измерений при низких температурах [6]. При изменении температуры измерения от низких к комнатным имеет место небольшое смещение пиков, принадлежащих дефектам V₂O и V₃O, в область более низких частот.

В то же время следует отметить, что совокупность наших результатов не подтверждает выводы авторов [8] о том, что комплекс V₂O обуславливает полосу поглощения у 839 см⁻¹, а комплекс V₃O – полосу у 884 см⁻¹. Эти выводы были сделаны на основе анализа (подгонки) спектров,

измеренных при комнатной температуре для кристаллов, облученных быстрыми нейтронами. Более подробно данный вопрос будет рассмотрен в отдельной публикации.

Заклучение. На основании анализа спектров ИК-поглощения, измеренных при комнатной температуре, определено положение локальных колебательных мод (ЛКМ), обусловленных валентными колебаниями узловых атомов кислорода в природном кремнии, содержащем изотопы ^{28}Si , ^{29}Si и ^{30}Si . Для основной моды А-центра (^{28}Si - $^{16}\text{O}_\text{S}$ - ^{28}Si) ЛКМ находится у $830,3\text{ см}^{-1}$, а полуширина полосы поглощения составляет $5,3 \pm 0,25\text{ см}^{-1}$. Изотопические сдвиги ЛКМ равны $2,2 \pm 0,25\text{ см}^{-1}$ для ^{28}Si - $^{16}\text{O}_\text{S}$ - ^{29}Si и $4,3 \pm 0,9\text{ см}^{-1}$ для ^{28}Si - $^{16}\text{O}_\text{S}$ - ^{30}Si по отношению к полосе, связанной с ^{28}Si - $^{16}\text{O}_\text{S}$ - ^{28}Si .

С учетом полученных результатов изучены процессы формирования и отжига колебательных полос поглощения в облученных кислородсодержащих образцах кремния при термообработках в температурном интервале $200\text{--}400\text{ }^\circ\text{C}$. Установлено, что за полосы поглощения, расположенные при комнатной температуре у $825,8$ и $839,2\text{ см}^{-1}$, ответственны комплексы дивакансия–кислород и тривакансия–кислород, соответственно.

Благодарности. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф20-111).

Acknowledgements. The work was partially supported by the Belarusian Republican Foundation for Basic Research (project no. Ф20-111).

Список использованных источников

1. Oxygen defect processes in silicon and silicon germanium / A. Chroneos [et al.] // *Appl. Phys. Rev.* – 2015. – Vol. 2. – P. 021306 (1–15). <https://doi.org/10.1063/1.4922251>
2. Pajot B., Clerjaud B. Optical absorption of impurities and defects in semiconducting crystal: Defect engineering in Czochralski silicon by electron irradiation at different temperatures / J. L. Lindstrom [et al.] // *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B.* – 2002. – Vol. 186, № 1/4. – P. 121–125. [https://doi.org/10.1016/s0168-583x\(01\)00871-0](https://doi.org/10.1016/s0168-583x(01)00871-0)
3. Optical Absorption of Impurities and Defects in Semiconducting Crystal: Electronic Absorption of Deep Centres and Vibrational Spectra. – Berlin; Heidelberg: Springer, 2013. – 463 p.
4. Thermal double donor annihilation and oxygen precipitation at around $650\text{ }^\circ\text{C}$ in Czochralski-grown Si: local vibrational mode studies / L. I. Murin [et al.] // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2005. – Vol. 17, № 22. – P. S2237–S2246. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/22/011>
5. Коршунов, Ф. П. Радиационная технология изготовления мощных полупроводниковых приборов / Ф. П. Коршунов, Ю. В. Богатырев // *Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук.* – 2008. – № 4. – С. 106–114.
6. Толкачева, Е. А. Оптические свойства и механизм образования вакансионно-кислородных комплексов V_2O_2 и V_3O_2 в облученных кристаллах кремния / Е. А. Толкачева, В. П. Маркевич, Л. И. Мурин // *Физика и техника полупроводников.* – 2018. – Т. 52, № 9. – С. 973–979.
7. Толкачева, Е. А. Влияние изотопного состава природного кремния на локальные колебательные моды вакансионно-кислородных комплексов / Е. А. Толкачева, Л. И. Мурин // *Журн. приклад. спектроскопии.* – 2013. – Т. 80, № 4. – С. 586–590.
8. Londos, C. A. IR studies of oxygen-vacancy related defects in irradiated silicon / C. A. Londos, L. G. Fytros, G. J. Georgiou // *Defect and Diffusion Forum.* – 1999. – Vol. 171/172. – P. 1–32. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ddf.171-172.1>
9. Pajot, B. Optical absorption of impurities and defects in semiconducting crystal: I / B. Pajot. – Berlin; Springer: Hydrogen-like centres, 2010. – 470 p.
10. The trivacancy and trivacancy-oxygen family of defects in silicon / V. P. Markevich [et al.] // *Solid State Phenom.* – 2014. – Vol. 205/206. – P. 181–190. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ssp.205-206.181>

References

1. Chroneos A., Sgourou E. N., Londos C. A., Schwingenschlögl U. Oxygen defect processes in silicon and silicon germanium. *Applied Physics Reviews*, 2015, vol. 2, pp. 021306 (1–15). <https://doi.org/10.1063/1.4922251>
2. Lindström J. L., Murin L. I., Hallberg T., Markevich V. P., Svensson B. G., Kleverman M., Hermansson J. Defect engineering in Czochralski silicon by electron irradiation at different temperatures. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2002, vol. 186, no. 1–4, pp. 121–125. [https://doi.org/10.1016/s0168-583x\(01\)00871-0](https://doi.org/10.1016/s0168-583x(01)00871-0)
3. Pajot B., Clerjaud B. *Optical Absorption of Impurities and Defects in Semiconducting Crystal: Electronic Absorption of Deep Centres and Vibrational Spectra*. Berlin, Heidelberg, Springer, 2013. 463 p.
4. Murin L. I., Lindstrom J. L., Markevich V. P., Misiuk A., Londos C. A. Thermal double donor annihilation and oxygen precipitation at around $650\text{ }^\circ\text{C}$ in Czochralski-grown Si: local vibrational mode studies. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2005, vol. 17, no. 22, pp. S2237–S2246. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/22/011>

5. Korshunov F. P., Bogatyrev Yu. V. Radiation technology for manufacturing powerful semiconductor devices. *Vestsi Natsyunal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-technichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series*, 2008, no. 4, pp. 106–114 (in Russian).

6. Tolkacheva E. A., Markevich V. P., Murin L. I. Optical Properties and the Mechanism of the Formation of V_2O_2 and V_3O_2 Vacancy–Oxygen Complexes in Irradiated Silicon Crystals. *Semiconductors*, 2018, vol. 52, no. 9, pp. 1097–1103. <https://doi.org/10.1134/s1063782618090221>

7. Tolkacheva E. A., Murin L. I. Influence of the isotopic composition of natural silicon on local vibrational modes of vacancy-oxygen complexes. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2013, vol. 80, no. 4, pp. 571–575. <https://doi.org/10.1007/s10812-013-9807-3>

8. Londos C. A. IR studies of oxygen-vacancy related defects in irradiated silicon. *Defect and Diffusion Forum*, 1999, vol. 171–172, pp. 1–32. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ddf.171-172.1>

9. Pajot B. *Optical Absorption of Impurities and Defects in Semiconducting Crystal: I*. Berlin, Springer, Hydrogen-like centres, 2010. 470 p.

10. Markevich V. P., Peaker A. R., Hamilton B., Lastovskii S. B., Murin L. I., Coutinho J., Rayson M. J., Briddon P. R., Svensson B. G. The trivacancy and trivacancy-oxygen family of defects in silicon. *Solid State Phenomena*, 2014, vol. 205–206, pp. 181–190. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ssp.205-206.181>

Информация об авторах

Толкачева Екатерина Анатольевна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: talkachova@physics.by

Маркевич Владимир Павлович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Университет г. Манчестер (Manchester M13 9PL, United Kingdom). E-mail: V.Markevich@manchester.ac.uk

Мурин Леонид Иванович – ведущий научный сотрудник, кандидат физико-математических наук, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь).

Information about the authors

Ekaterina A. Tolkacheva – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovki Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: talkachova@physics.by

Vladimir P. Markevich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Photon Science Institute and School of Electrical and Electronic Engineering, The University of Manchester (Manchester M13 9PL, United Kingdom). E-mail: V.Markevich@manchester.ac.uk

Leonid I. Murin – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovki Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus).

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 539.12.043; 621.38

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-488-495>

Поступила в редакцию 13.07.2020

Received 13.07.2020

А. С. Якушевич¹, Ю. В. Богатырев¹, Н. А. Василенков², С. С. Грабчиков¹,
С. Б. Ластовский¹, А. Ю. Максимов²

¹Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению,
Минск, Беларусь

²АО «ТЕСТПРИБОР», Москва, Российская Федерация

ОСЛАБЛЕНИЕ ПОТОКОВ ЭЛЕКТРОНОВ РАДИАЦИОННЫХ ПОЯСОВ ЗЕМЛИ ЗАЩИТНЫМИ ЭКРАНАМИ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИТА W-Cu

Аннотация. Для снижения дозовых нагрузок на электронную компонентную базу космических аппаратов от потоков электронов и протонов радиационных поясов Земли применяются экраны локальной радиационной защиты. Такие экраны изготавливают на основе материалов с большим порядковым номером и высокой плотностью (вольфрам, тантал, композит W-Cu и др.), а затем интегрируют в металлокерамические корпуса электронных компонентов с недостаточным уровнем радиационной стойкости. Методом Монте-Карло рассмотрены способы снижения уровня поглощенной дозы кристаллами активных элементов с помощью экранов радиационной защиты на основе композита W-Cu в гибридных металлических корпусах при воздействии электронов круговой орбиты с углом наклона 30° и высотой 8000 км. Спектры электронов при максимуме и минимуме солнечной активности были получены с помощью программы OMERE 5.3. Установлено, что увеличение массовой толщины основания и крышки корпусов экранами до значения 1,67 г/см² позволяет снизить дозовую нагрузку в 3,5–3,7 раза при минимуме и 3,9–4,1 раза при максимуме солнечной активности. А оптимизация защиты путем опускания верхнего слоя композита W-Cu к основанию до высоты 1,2 мм уменьшает значение поглощенной дозы в 6,8–9,3 раза при минимуме и 7,6–10,7 раза при максимуме солнечной активности.

Ключевые слова: радиационный экран, композит W-Cu, электроны, метод Монте-Карло

Для цитирования. Ослабление потоков электронов радиационных поясов Земли защитными экранами на основе композита W-Cu / А. С. Якушевич [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 488–495. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-488-495>

Hanna S. Yakushevich¹, Yrii V. Bogaturev¹, Nikolaj A. Vasilenkov², Sergey S. Grabchikov¹,
Stanislav B. Lastovski¹, Aleksej Y. Maksimov²

¹Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

²JSC «TESTPRIBOR», Moscow, Russia

ATTENUATION OF EARTH'S RADIATION BELT ELECTRONS WITH PROTECTIVE SHIELDS BASED ON COMPOSITE W-Cu

Abstract. For decreasing the radiation effects of the cosmic environment on the electronic components of spacecraft, local protection shields are used. They are manufactured on the basis of materials with high density and large atomic numbers (tungsten, tantalum, the W-Cu composite etc.) and then integrated into the ceramic-and-metal package of electronic components with an insufficient level of radiation resistance. On the basis of the Monte Carlo approach we considered the methods of decreasing the level of the dose absorbed by the crystals of active elements if using the radiation shields based on the W-Cu composite in hybrid metal cases under the action of electrons of a circular orbit with an inclination angle of 30° and an altitude of 8000 km. The electron spectra at the maximum and minimum solar activity were obtained using OMERE 5.3 software. It was established that an increase in the mass thickness of the base and cover of cases with shields up to 1.67 g / cm² makes it possible to reduce the dose load by 3.5–3.7 times at the minimum and by 3.9–4.1 times at the maximum of solar activity. The optimization of protection by lowering the upper layer of the W-Cu composite to the base to a height of 1.2 mm reduces the absorbed dose by 6.8–9.3 times at the minimum and by 7.6–10.7 times at the maximum solar activity.

Keywords: radiation shield, W-Cu composite, electrons, Monte Carlo method

For citation. Yakushevich H. S., Bogaturev Y. V., Vasilenkov N. A., Grabchikov S. S., Lastovski S. B., Maksimov A. Y. Attenuation of Earth's radiation belt electrons with protective shields based on composite W-Cu. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 488–495 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-488-495>

Введение. Экраны локальной радиационной защиты (ЭЛРЗ) применяются для снижения дозовых нагрузок на электронную компонентную базу космических аппаратов (КА) от потоков электронов и протонов радиационных поясов Земли (РПЗ). Суть метода применения ЭЛРЗ заключается в интегрировании защитных экранов в металлокерамические корпуса электронных компонентов с недостаточным уровнем радиационной стойкости [1–6]. Метод просто реализуем в блоках радиоэлектронных средств третьего поколения, где используется монтаж корпусированных электронных компонентов на платы [6]. Экраны локальной радиационной защиты изготавливают на основе материалов с большим порядковым номером и высокой плотностью (вольфрам, тантал, композит W-Cu и др.), что позволяет при незначительных изменениях конструкции и габаритных размеров существенно повысить защитные функции корпуса интегральных микросхем.

В блоках радиоэлектронных средств авиакосмической техники четвертого поколения используется бескорпусной монтаж кристаллов активных элементов на коммутационные платы [7]. Несколько микросборок в виде таких плат помещают в металлический корпус-экран, герметизируемый либо по торцам, либо по верхней крышке. Связь с другими блоками осуществляется через разъемы в боковых стенках. Помимо бескорпусных микросборок в корпус блока могут монтироваться пассивные электронные компоненты, которые, например, нельзя выполнить в пленочном исполнении. Если это каркасные катушки индуктивности, то высота боковых стенок такого корпуса составляет от 10 и более миллиметров [7]. Подобного типа гибридные корпуса необходимы для различного рода мощных источников вторичного электропитания, преобразователей напряжения и др.

Цель настоящей работы – показать расчетными методами возможные способы снижения уровня поглощенной дозы кристаллами активных элементов с помощью экранов радиационной защиты на основе композита W-Cu в гибридных металлических корпусах радиоэлектронной аппаратуры при воздействии электронов радиационных поясов Земли.

Методика расчета. Определение поглощенных доз D проводилось для шести кремниевых кристаллов (активных элементов), обозначенных в данной работе как транзисторы VT1–VT6. Кристаллы транзисторов смонтированы по бескорпусной технологии в центральной области (VT5), по краям (VT1, VT3 и VT6) и в углах (VT2 и VT4) коммутационной платы (рис. 1, *a*). Размер каждого кристалла составляет $0,90 \times 0,90 \times 0,24$ мм³. Размер платы и положение каждого кристалла на ней указаны на рис. 1, *a*. Отметим, что тип активных элементов и размеры их кристаллов выбраны произвольно, и для определения значения D не играют существенной роли. Из расчетной модели исключены пассивные компоненты (резисторы, конденсаторы, каркасные катушки индуктивности и т. д.), способные создать некоторую теньевую защиту активным элементам от ионизирующих излучений. Это позволяет рассматривать защитные свойства только стенок корпуса и встроенных радиационных экранов.

Плата с транзисторами помещена в металлический корпус пенального типа, герметизируемый по верхней крышке. Внутренние размеры нижнего и верхнего оснований корпуса соответствуют размерам платы. Исследовались три типа корпусов: без экранов радиационной защиты (тип I) (рис. 1, *b*), с экранами (тип II) (рис. 1, *c*) и с экранами оптимизированной конструкции (тип III) (рис. 1, *d*). Внешние размеры всех корпусов практически совпадают и показаны на рис. 1, *b–d*. Имеется лишь незначительное различие по высоте: у корпуса типа I она составляет 10,0 мм, а у типов II и III – 9,8 мм. Боковые стенки всех корпусов изготовлены из сплава НК29 (ковар) толщиной 1,2 мм.

Верхнее и нижнее основания корпуса типа I также выполнены из ковара, толщины которых показаны на рис. 1, *b*. У корпусов типов II и III усиление защиты проведено только для крышки и основания, что проще реализовать технически в процессе изготовления серийных гибридных корпусов. Основание обоих корпусов с радиационными экранами (см. рис. 1, *c* и *d*) имеет толщину 1,2 мм и состоит из слоя композита W-Cu толщиной 0,8 мм между двумя слоями меди по 0,2 мм толщиной для усиления теплоотводящих свойств. Плотность материала композита W-Cu равна 16,5 г/см³, а суммарная массовая толщина основания с защитным экраном и слоями меди – 1,67 г/см². Верхние крышки корпусов, изготовленные из ковара толщиной 0,9 мм, усилены

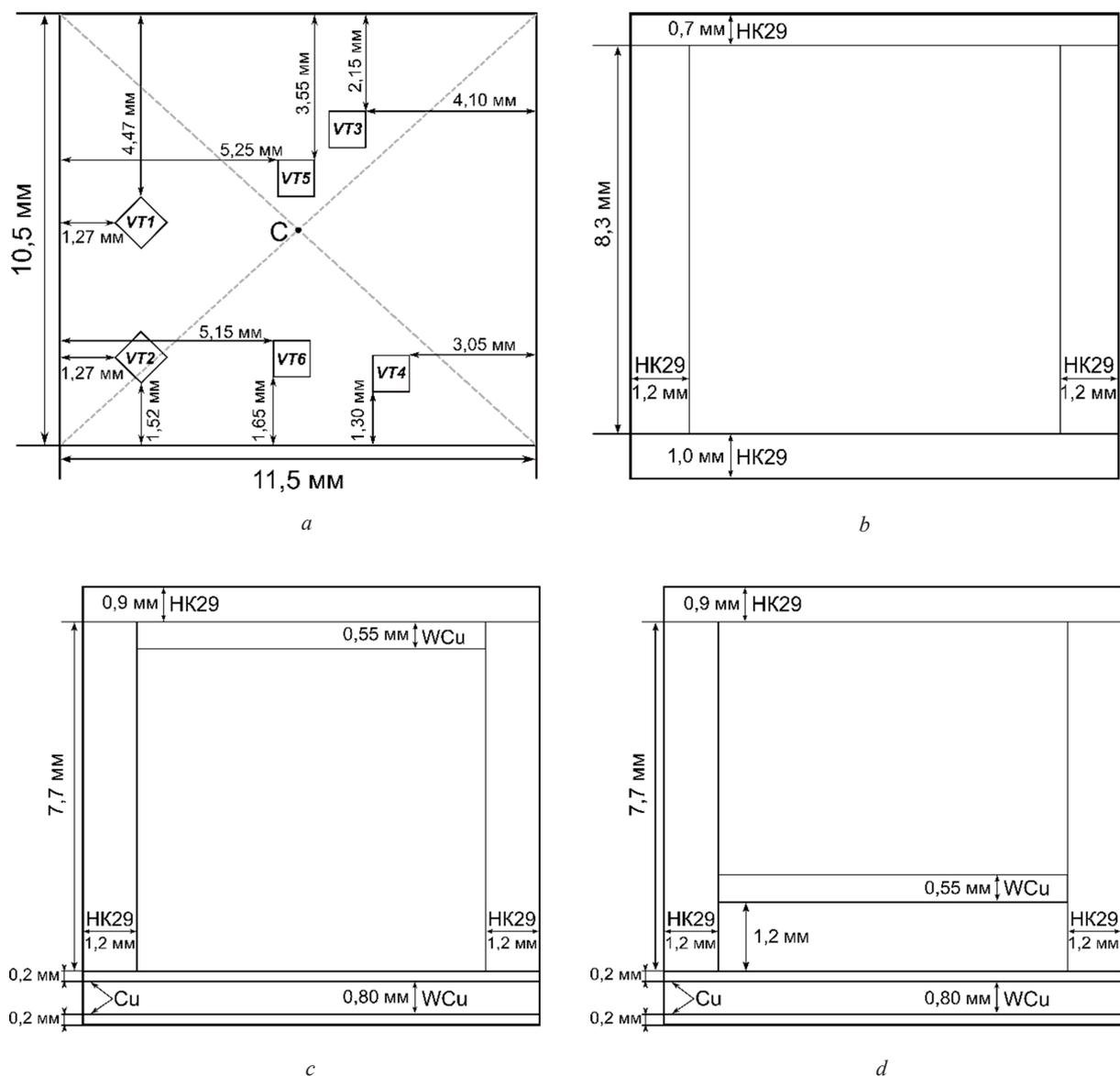


Рис. 1. Расположение кристаллов кремния на коммутационной плате (а) и вертикальные сечения корпусов типа I (b), II (c) и III (d)

Fig. 1. The arrangement of silicon crystals on the backplane (a) and the vertical sections of the packages of type I (b), II (c) and III (d)

дополнительным слоем композита W-Cu толщиной 0,55 мм до суммарной массовой толщины, равной $1,67 \text{ г/см}^2$. Основным отличием между корпусами типов II и III является различное положение верхнего защитного слоя W-Cu относительно основания. В первом случае он располагается непосредственно под крышкой корпуса (см. рис. 1, c), а во втором – на высоте 1,2 мм от основания корпуса, т. е. приближен к активным элементам на расстояние ~ 1 мм (см. рис. 1, d). Указанное значение высоты в данной модели выбрано произвольно. Положение экрана относительно основания в реальных корпусах может быть другим, так как будет зависеть от толщины и типа печатной платы, а также размеров элементов навесного монтажа. Оно будет отличаться, например, для одно- и двухсторонних, а также многослойных печатных плат. В настоящее время существует большое число конструктивно-технологических разновидностей печатных плат, и все их невозможно рассмотреть в рамках настоящей работы. Учитывая то, что коммутационная плата в весьма незначительной степени ослабляет поток ионизирующего излучения по

сравнению с основанием и другими стенками корпуса, она, так же как и пассивные компоненты, исключена из расчетной модели, т. е. кристаллы транзисторов расположены на основаниях корпусов всех трех типов согласно рис. 1, а.

Суммарная поглощенная доза D рассчитывалась по формуле [8]

$$D = \int \frac{D_0(E)}{\Phi} \varphi(E) dE, \quad (1)$$

где $\varphi(E)$ – дифференциальный спектр электронов; $D_0(E)$ – поглощенная доза в зависимости от энергии E электронов; Φ – флюенс электронов. Величина поглощенной дозы от электронного излучения на единичный флюенс $\left(\frac{D_0(E)}{\Phi}\right)$ в формуле (1) фактически определяет уровень поглощенной дозы от одного электрона.

С помощью программного комплекса Geant4 v.10.5 методом Монте-Карло [9] для каждого значения энергии E из спектра электронов рассчитывалась поглощенная доза D_0 в каждом кристалле кремния для всех типов корпусов. Корпуса размещались в изотропном поле электронного излучения с флюенсом $\Phi = 4,1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$. При этом учитывался вклад от вторичных электронов и тормозного излучения. Далее в соответствии с формулой (1) методом численного интегрирования были получены значения суммарных поглощенных доз D в кристаллах кремния за 1 сут. В настоящей работе расчеты проводились для круговой орбиты с углом наклона $i = 30^\circ$ и высотой $H = 8000 \text{ км}$. Дифференциальные спектры электронов $\varphi(E)$ при максимуме и минимуме солнечной активности (С. а.) были получены с помощью программы OMERE 5.3 [10].

Результаты и обсуждение. Полученные в результате моделирования зависимости $D_0(E)$ для кристаллов кремниевых транзисторов в корпусах трех типов представлены на рис. 2. Для каждого типа корпуса показаны семейства из шести зависимостей, которые на графике наиболее заметно различаются для корпуса типа III. Для корпусов типов I и II кривые $D_0(E)$ всех шести активных элементов платы лежат достаточно близко.

Согласно представленным результатам можно заключить, что все зависимости $D_0(E)$ имеют одинаковый вид, а именно: с ростом энергии электронов значение поглощенной дозы растет нелинейно. При этом до определенной энергии электронов значение D_0 совсем незначительно. Для корпуса типа I значение этой «пороговой» энергии составляет порядка 1,2 МэВ, а для типов II и III – 2,0 МэВ. Не вызывает особых возражений и то, что электроны с энергией ниже «пороговой» полностью тормозятся стенками корпусов, а накопленная кристаллами доза определяется исключительно низкоэнергетичным вторичным излучением, сгенерированным при взаимодействии первичных электронов с атомами материала стенок. Такой результат согласуется с данными экстраполированного пробега электронов в веществе. Так, у корпуса типа I крышка из кобальта имеет наименьшую по сравнению с остальными стенками массовую толщину, равную $0,59 \text{ г/см}^2$, и ей соответствует длина экстраполированного пробега электронов с $E = 1 \text{ МэВ}$ в Fe [11]. Боковые стенки двух других корпусов имеют массовую толщину $1,0 \text{ г/см}^2$. В то же время длина экстраполированного пробега электронов с $E = 1,5 \text{ МэВ}$ в Fe составляет $0,96 \text{ г/см}^2$. При этом для электронов с $E = 2,0 \text{ МэВ}$ длина экстраполированного пробега в Fe равна $1,31 \text{ г/см}^2$, а в W – $1,55 \text{ г/см}^2$ [11]. Следовательно, электроны с энергией до 2 МэВ активно поглощаются корпусами II и III типов.

Дальнейший рост энергии падающих на стенки корпуса первичных электронов выше «порогового» значения ведет к увеличению энергии и количества частиц, достигающих кристаллы кремния, в результате чего наблюдается существенное возрастание значения D_0 (см. рис. 2). Зависимости $D_0(E)$ для корпусов с дополнительными радиационными экранами (II и III типы) лежат значительно ниже, чем таковые для корпуса типа I. Это обусловлено большими значениями суммарных массовых толщин ($1,67 \text{ г/см}^2$) крышек и оснований корпусов со слоями композита W-Cu.

Опускание слоя композита W-Cu к основанию в конструкции корпуса типа III приводит к существенному увеличению массовой толщины вышележащих частей всех боковых стенок. Здесь электронам необходимо преодолеть не только эти стенки, но и защитный слой композита, чтобы

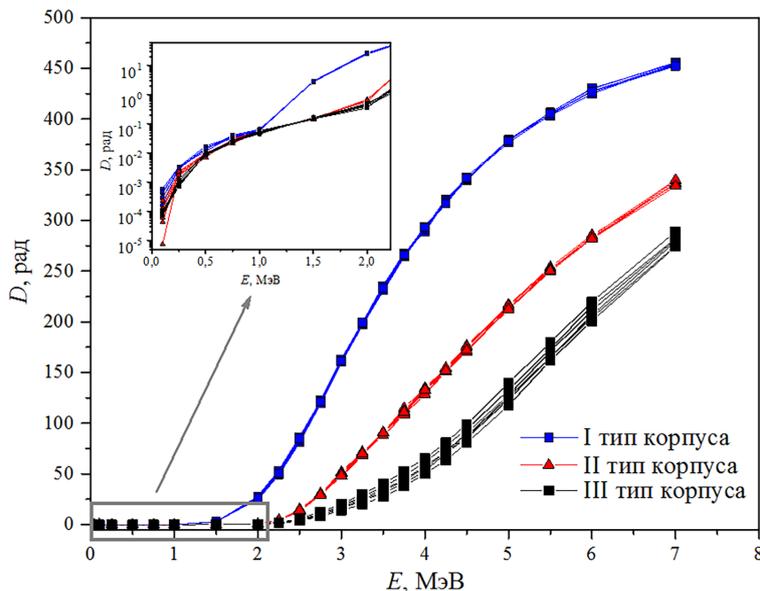


Рис. 2. Зависимости $D_0(E)$ для кристаллов кремниевых транзисторов в корпусах трех типов при облучении электронами флюенсом $\Phi = 4,1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$

Fig. 2. $D_0(E)$ dependencies for crystals of silicon transistors in three types of package under electron irradiation with fluence $\Phi = 4.1 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$

попасть в кристаллы активных элементов (см. рис. 1, *d*). Несложно оценить, что суммарная массовая толщина указанных элементов корпуса возрастает до 2,7–3,5 г/см². При этом суммарные массовые толщины остальных элементов (крышка, основание и части боковых стенок, лежащие ниже слоя композита W-Cu,) остаются такими же, как и у корпуса типа II. Из вышесказанного становится понятно, почему на графике (см. рис. 2) зависимости $D_0(E)$ кристаллов транзисторов в корпусе типа III лежат ниже таких же зависимостей, рассчитанных для корпуса типа II.

Таким образом, можно сделать вывод, что наибольшей эффективностью защиты активных элементов от потоков электронов радиационных поясов Земли обладает корпус типа III. Это полностью подтверждается данными по вычислению в соответствии с формулой (1) суммарных поглощенных доз D в кристаллах кремниевых транзисторов (таблица).

Суммарные поглощенные дозы в кристаллах кремниевых транзисторов, расположенных в корпусах всех типов, от электронов круговой орбиты с углом наклона $i = 30^\circ$ и высотой $H = 8000$ км при минимуме и максимуме солнечной активности

Total absorbed doses in the crystals of silicon transistors located in all types of packages for trapped electrons on circular orbit of 8000 km with an inclination of 30° at solar minimum and solar maximum activity

Положение на плате	D , рад/сут					
	Минимум солнечной активности			Максимум солнечной активности		
	I тип корпуса	II тип корпуса	III тип корпуса	I тип корпуса	II тип корпуса	III тип корпуса
VT1	36,01	9,96	4,63	117,13	29,82	13,53
VT2	35,62	10,05	5,24	115,74	29,79	15,27
VT3	36,63	9,86	4,32	119,47	29,61	12,36
VT4	35,81	10,03	4,79	116,63	29,93	13,60
VT5	36,74	9,87	3,95	119,38	29,37	11,12
VT6	36,18	10,06	4,42	117,86	30,27	12,71

Эффективность радиационной защиты электронных компонентов корпусами от воздействия электронов K_e можно оценить из отношений

$$K_e = D_I / D_{sh}, \tag{2}$$

где D_1 – накопленная доза кристаллами кремния в корпусе без радиационного экрана типа I, а D_{sh} – накопленная доза в корпусе с радиационными экранами. Эффективность экранирования корпусом типа II составляет 3,5–3,7 при минимуме солнечной активности и 3,9–4,1 при ее максимуме. Соответственно эффективность экранирования корпусом типа III составляет 6,8–9,3 при минимуме и 7,6–10,7 при максимуме С. а.

В заключение следует отметить тот факт, что значения D кристаллов транзисторов в корпусе типа III явно зависят от их положения на коммутационной плате (см. таблицу). Максимальная разница в накопленной дозе активными элементами в корпусе типа III при минимуме и максимуме солнечной активности составляет 25 и 27 % соответственно. При этом такая же разница для корпусов типов I и II равняется 2–3 % и сопоставима со статистической погрешностью моделирования. Столь большое различие в значениях D для корпуса типа III также вытекает и из расхождений кривых $D_0(E)$ (см. рис. 2). Если расположить транзисторы по мере удаленности от двух ближайших боковых стенок (см. рис. 1, а): VT2 (1,27 и 1,52 мм), VT4 (1,3 и 2,15 мм), VT1 (1,27 и 4,47 мм), VT6 (1,65 и 5,15 мм), VT3 (2,15 и 4,10 мм), VT5 (3,55 и 5,15 мм), то такой порядок соответствует монотонному уменьшению их значения D (см. таблицу). Указанная закономерность позволяет дать следующее объяснение полученным результатам. Выше уже отмечалось, что у корпусов типов II и III массовые толщины крышки и основания больше толщины боковых стенок. Суммарное количество излучения (первичные и вторичные электроны, а также тормозные гамма-кванты), падающего на кристалл от любой стороны корпуса, определяется телесным углом, под которым эта сторона видна из точки расположения кристалла. Очевидно, что величина телесного угла увеличивается с уменьшением расстояния между кристаллом и боковой стенкой, и значение D должно возрастать, что и наблюдается при расчетах для корпуса типа III (см. таблицу). С помощью геометрических построений несложно показать, что этот эффект уменьшается с увеличением высоты стенок, что подтверждается полученными результатами для корпуса типа II.

Для более полного анализа зависимости значения D от положения кристаллов активных элементов на плате необходимо сравнить спектры рассеянных первичных и сгенерированных вторичных электронов, а также тормозных гамма-квантов всеми стенками и защитными экранами корпуса для каждого транзистора. Следует отметить, что одной из возможных причин зависимости значения D от положения кристалла на плате в корпусе типа III может быть также эффект теневого экранирования транзисторами друг друга. При этом изменение размеров корпуса может существенно изменить вид полей ионизирующих излучений. Все эти особенности требуют проведения дополнительных исследований.

Заключение. Таким образом, с помощью программного комплекса Geant4 рассмотрены способы снижения уровня поглощенной дозы D кристаллами активных элементов с использованием экранов радиационной защиты на основе композита W-Cu в гибридных металлических корпусах блоков радиоэлектронных средств четвертого поколения при воздействии электронов круговой орбиты с углом наклона $i = 30^\circ$ и высотой $H = 8000$ км. Показано, что увеличение массовой толщины основания и крышки корпусов экранами до значения $1,67$ г/см² позволяет снизить дозовую нагрузку в 3,5–3,7 раза при минимуме и 3,9–4,1 раза при максимуме солнечной активности. Оптимизация защиты путем опускания верхнего слоя композита W-Cu к основанию до высоты 1,2 мм уменьшает значение D в 6,8–9,3 раза при минимуме и 7,6–10,7 раза при максимуме солнечной активности.

Список использованных источников

1. Новые материалы локальной радиационной защиты / Г. Ефремов [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2003. – № 1. – С. 34–37
2. Заболотный, В. Т. Оптимальные составы для локальной защиты бортовой электроники от космической радиации / В. Т. Заболотный, Е. Е. Старостин, А. В. Кочетков // Физика и химия обработки материалов. – 2008. – № 5. – С. 15–18.
3. Специализированные радиационно-защитные корпуса для изделий микроэлектроники / Н. А. Василенков [и др.] // Технологии в электронной промышленности. – 2015. – № 4. – С. 85–88.

4. Effectiveness of IC shielded packages against space radiation / J. P. Spratt [et al.] // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 1997. – Vol. 44, № 6. – P. 2018–2025. <https://doi.org/10.1109/23.658984>
5. Shielding considerations for satellite microelectronics / W. S. Fan [et al.] // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 1996. – Vol. 43, № 6. – P. 2790–2796. <https://doi.org/10.1109/23.556868>
6. Экраны локальной радиационной защиты изделий микроэлектронной техники / Ю. В. Богатырев [и др.] // Вопр. атом. науки и техники. Сер. Физика радиац. воздействия на радиоэлектрон. аппаратуру. – 2014. – Вып. 4. – С. 53–56.
7. Белоусов, Е. Л. Конструирование блоков бортовой авиационной аппаратуры связи / Е. Л. Белоусов, М. Н. Ушкар. – Н. Новгород: НГТУ, 2005. – 237 с.
8. Чумаков, А. И. Действие космической радиации на интегральные схемы / А. И. Чумаков. – М.: Радио и связь, 2004. – 320 с.
9. Geant4 [Electronic resource] // Geant4 Collaboration. – Mode of access: <http://geant4.web.cern.ch/>. – Date of access: 20.09.2019.
10. OMERE 5.3. [Electronic resource] // TRAD Tests & Radiations. – Mode of access: <https://www.trad.fr/en/space/omere-software/>. – Date of access: 15.11.2019.
11. Баранов, В. Ф. Дозиметрия электронного излучения / В. Ф. Баранов. – М.: Атомиздат, 1974. – 232 с.

References

1. Efremov G. A., Yepifanovskii I. S., Shiryayev A. V., Zabolotnyi V. T., Mileev V. N., Novikov L. S. New materials of local radiation protection. *Fizika i khimiya obrabotki materialov = Physics and Chemistry of Materials Treatment*, 2003, no. 1, pp. 34–37 (in Russian).
2. Zabolotnyi V. T., Starostin E. E., Kochetkov A. V. Optimal compositions for local protection of on-board electronics from space radiation. *Fizika i khimiya obrabotki materialov = Physics and Chemistry of Materials Treatment*, 2008, no. 5, pp. 15–18 (in Russian).
3. Vasilenkov N. A., Grabchikov S. S., Maksimov A. Y., Lastovski S. B. Specialized radiation-protective packages for microelectronics products. *Tekhnologii v elektronnoy promyshlennosti = Technologies in Electronic Industry*, 2015, no. 4, pp. 50–56 (in Russian).
4. Spratt J. P., Passenheim B. C., Leadon R. E., Clark S., Strobel D. J. Effectiveness of IC shielded packages against space radiation. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 1997, vol. 44, no. 6, pp. 2018–2025. <https://doi.org/10.1109/23.658984>
5. Fan W. C., Drumm C. R., Roeske S. B., Scrivner G. J. Shielding Considerations for Satellite Microelectronics. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 1996, vol. 43, no. 6, pp. 2790–2796. <https://doi.org/10.1109/23.556868>
6. Bogatyrev Y. V., Vasilenkov N. A., Grabchikov S. S., Lastovski S. B., Yakushevich H. S., Pankratov P. V. Shields for local radiation protection of microelectronics. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Fizika radiatsionnogo vozdeystviya na radioelektronnyuyu apparaturu = Problems of atomic science and technology. Series: Physics of radiation effects on electronic equipment*, 2014, vol. 4, pp. 53–56 (in Russian).
7. Belousov E. L., Ushkar M. N. *Design of Aircraft Communication Equipment Blocks*. Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod State Technical University, 2005. 237 p. (in Russian).
8. Chumakov A. I. *The Effect of Cosmic Radiation on Integrated Circuits*. Moscow, Radio i svyaz' Publ., 2004. 320 p. (in Russian).
9. Geant4. *Geant4 Collaboration*. Available at: <http://geant4.web.cern.ch> (accessed 20 September 2019).
10. OMERE 5.3. *TRAD Tests & Radiations*. Available at: <https://www.trad.fr/en/space/omere-software/> (accessed 15 November 2019).
11. Baranov V. F. *Dosimetry of Electron Radiation*. Moscow, Atomizdat Publ., 1974. 232 p. (in Russian).

Информация об авторах

Якушевич Анна Сергеевна – младший научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь), E-mail: yakushevich@ifftp.bas-net.by

Богатырев Юрий Владимирович – доктор технических наук, главный научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: bogat@physics.by

Василенков Николай Алексеевич – технический директор, АО «ТЕСТПРИБОР» (ул. Планерная, 7а, 125480, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: tp@test-expert.ru

Грabcиков Сергей Степанович – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,

Information about the authors

Hanna S. Yakushevich – Junior Researcher, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yakushevich@ifftp.bas-net.by

Yurii V. Bogatyrev – Dr. Sc. (Engineering), Chief Researcher, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: bogat@physics.by

Nikolaj A. Vasilenkov – Technical Director, JSC «TESTPRIBOR» (7a, Planernaya Str., 125480, Moscow, Russia). E-mail: tp@test-expert.ru

Sergey S. Grabchikov – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Chief Researcher, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences

Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровка, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: gss@ifftp.bas-net.by

Ластовский Станислав Брониславович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровка, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: lastov@ifftp.bas-net.by

Максимов Алексей Ювиславович – начальник конструкторского бюро, АО «ТЕСТПРИБОР» (ул. Планерная, 7а, 125480, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: tp@test-expert.ru

of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gss@ifftp.bas-net.by

Stanislav B. Lastovskii – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the laboratory, Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lastov@ifftp.bas-net.by

Aleksej Y. Maksimov – Chief of the Engineering Department, JSC «ТЕСТПРИБОР» (7а, Planernaya Str., 125480, Moscow, Russian Federation). E-mail: tp@test-expert.ru

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 517.44; 517.58; 51-72; 239.199

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-496-503>

Поступила в редакцию 11.07.2019

Received 11.07.2019

**А. В. Батяновский¹, В. А. Намиот², И. В. Филатов³,
В. Г. Туманян⁴, Н. Г. Есипова⁴, И. Д. Волотовский¹**

¹*Институт биофизики клетки и клеточной инженерии
Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

²*Научно-исследовательский институт ядерной физики Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

³*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

⁴*Институт молекулярной биологии им. В. А. Энгельгардта
Российской академии наук, Москва, Россия*

ФУРЬЕ-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ В СФЕРИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ КООРДИНАТ КАК ИНСТРУМЕНТ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

Аннотация. Рассмотрено применение наиболее распространенной адаптации Фурье-анализа в сферических системах координат для решения ряда задач структурной биологии, а именно: разложения по плоским волнам (при этом плоские волны представляются в виде разложения по сферическим функциям). Приводятся аргументы в пользу этого разложения в сравнении с другими разложениями по суперпозициям специальных функций. Получено более общее обоснование корректности данного разложения, чем существующие в настоящее время. Предложен способ представления групп атомов в виде Фурье-объекта и рассмотрены его возможности. Обсуждаются перспективы применения Фурье-анализа в структурной биофизике.

Ключевые слова: Фурье-анализ, функции Бесселя, вычислительно обоснованный докинг и сравнение белковых глобул, разложение по специальным функциям математической физики

Для цитирования. Фурье-преобразование в сферических системах как инструмент решения физических задач структурной биологии / А. В. Батяновский [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2020. – Т. 56, № 4. – С. 496–503. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-496-503>

**Alexander V. Batyanovskii¹, Vladimir A. Namiot², Ivan V. Filatov³, Vladimir G. Tumanyan⁴,
Natalia G. Esipova⁴, Igor D. Volotovskiy¹**

¹*Institute of Cell Biophysics and Cell Technology of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus;*

²*Institute of Nuclear Physics of the Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

³*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia*

⁴*Engelhard Institute of Molecular Biology of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

FOURIER TRANSFORMATION IN SPHERICAL SYSTEMS AS A TOOL OF STRUCTURAL BIOLOGY

Abstract. Applications of the most common adaptation of Fourier analysis in spherical coordinate systems used to solve a number of problems in structural biology, namely, flat wave decomposition (flat waves are represented as spherical functions decomposition), are herein considered. Arguments in favor of this decomposition are compared with other decompositions in superposition of special functions. A more general justification for the correctness of this decomposition is obtained than that existing today. A method for representing groups of atoms in the form of a Fourier object is proposed. It is also considered what opportunities give such a representation. The prospects for the application of Fourier analysis in structural biophysics are discussed.

Keywords: Fourier analysis, Bessel functions, computationally supporter docking and comparison of protein globules, decomposition in special functions of mathematical physics

For citation. Batyanovskii A. V., Namiot V. A., Filatov I. V., Tumanyan V. G., Esipova N. G., Volotovskiy I. D. Fourier transformation in spherical systems as a tool of structural biology. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 496–503 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-496-503>

Фурье-анализ является одним из самых распространенных методов интегральных преобразований, который широко применяется при анализе сложных процессов и пространственных структур, в первую очередь при анализе сигналов и явлений волновой природы. Кроме того, он

обладает рядом важных математических и вычислительных особенностей, позволяющих получить или упростить решение математических задач, связанных с дифференцированием и интегрированием, в частности, реализовывать на его основе вычисления *in silico*. Однако подобное применение Фурье-анализа требует использования специальных приемов по адаптации его базисного аппарата при поиске решения конкретных задач.

В предлагаемой статье рассмотрены особенности адаптации Фурье-анализа к задачам современной структурной биологии, проведено подтверждение ее основного принципа и обсуждены несовершенства и пробелы, предложен вариант получения Фурье-образа многоатомного объекта, проанализированы некоторые приемы работы с такими объектами и изучена применимость и перспективы Фурье-анализа в молекулярной биологии.

В настоящее время опубликовано значительное количество работ по представлению макромолекулярных объектов в виде разложений по комбинациям различных специальных функций [1–7]. Обычно эти подходы преследуют цели, связанные с оценкой пространственной симметрии в белковых структурах [2], сравнением профилей поверхностей молекул [3, 4] или же решением задач поиска мест посадки / избирательного контакта [5–7]. В таких задачах для быстрых пересчетов возможных вариантов взаимной ориентации весьма привлекательными являются методы, основанные на использовании сферических систем координат и сферических гармоник как специальных функций разложения исходных функций.

Наиболее перспективным в этом направлении является Фурье-разложение в силу ряда математических свойств Фурье-объектов и возможностей Фурье-анализа. В этом качестве Фурье-разложения в сферических координатах предлагается разложение по плоским волнам (пространственным компонентам стоячих плоских волн), суть которого сводится к тому, что коль скоро в решение волнового уравнения входит пространственная функция

$$e^{-2\pi i \vec{\xi} \cdot \vec{r}},$$

то решение такого уравнения в сферических координатах является формой Фурье для него. Следует отметить ряд исследований, в которых в сферических координатах производятся разложения по комбинациям сферических гармоник, отвечающих за угловые координаты, с самыми разными функциями, отвечающими за радиальную компоненту. Следует упомянуть полиномы Лежандра, различные вариации функций Лагерра, полиномы Цернике и т. д. Более того, подобные разложения нередко продолжают именовать Фурье-преобразованием, хотя весьма сомнительно, что их можно каким-либо образом свести к Фурье-преобразованию в сферических системах координат.

Для последующего рассмотрения будем использовать соотношение [1]

$$F(k_r, k_\theta, k_\varphi) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{2\pi i r k (\cos \theta \cos k_\theta + \sin \theta \sin k_\theta \cos(\varphi - k_\varphi))} f(r, \theta, \varphi) d\varphi, \quad (1)$$

связывающее исходную функцию в сферических координатах $f(r, \theta, \varphi)$ и ее Фурье-образ $F(k_r, k_\theta, k_\varphi)$, зависящий от волнового вектора, который в свою очередь выражен опять же в сферических координатах.

Формула (1) пригодна для аналитического и прикладного использования лишь для узкого круга задач. Если при применении прямоугольных систем координат трехкратный интеграл 3D Фурье-преобразования существенно упрощен тем, что ядро преобразования позволяет разделять переменные, то в случае криволинейных координат использование таких интегралов, как правило, существенно осложнено, а применение ограничено. Для упрощения в случае использования сферических координат нами рассматривается вариант, когда исходная функция представима в виде произведения радиальной и угловой составляющих. Как показано в работе [8] (см. также [1] и Приложение к настоящей статье), важным для рассматриваемой задачи является соотношение

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \sum_{m=-n}^n (-1)^m P_n^m(\cos k_\theta) e^{-imk_\phi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta e^{iz(\cos \theta \cos k_\theta + \sin \theta \sin k_\theta \cos(\phi - k_\phi))} P_n^{-m}(\cos \theta) e^{im\phi} d\phi d\theta, \quad (2)$$

где $P_n^m(\cos k_\theta) e^{-imk_\phi}$ и $P_n^{-m}(\cos k_\theta) e^{imk_\phi}$ – ненормированные сферические и комплексно-сопряженные им функции соответственно.

Полагая возникшие при выводе уравнения (2) переменные k_ϕ и k_θ азимутальной и полярной компонентами волнового вектора, а также в результате сравнения (2) с (1), выявляется способ выражения Фурье-объектов в сферической системе координат в виде разложения по комбинациям сферических функций и функций Бесселя полуцелого порядка. Согласно (1) и (2), если исходная функция представима в виде разложения по сферическим функциям с коэффициентами $C_{m,n}(r)$, то Фурье-образ также представим в таком виде, но с коэффициентами

$$4\pi(-i)^n \int_0^\infty C_{n,-m}(r) J_{n+1/2}(kr) r^2 dr,$$

что в случае сферической симметрии исходной функции приводит к известной формуле Фурье-преобразования сферически-симметричной функции. Сравнивая представленный вывод с обычными подходами, исходящими из возможности разложения $e^{-2\pi i \vec{k} \vec{r}}$ по комбинациям соответствующих функций [8], отметим идентичность результатов, хотя случай разложения по плоским волнам требует для приведения к форме Фурье-преобразования еще и использования свойств ортогональности сферических гармоник и функций Бесселя.

Из подобных представленному выводу можно упомянуть также варианты, изложенные в образовательных курсах [9, 10], однако они не учитывают угловые координаты, и поэтому их результаты ограничиваются лишь случаями, где исходные функции зависят только от радиуса.

С учетом обобщения известного выражения для энергии электростатического взаимодействия открываются возможности решения физических задач в Фурье-представлении с отличными от координатного представления вычислительной сложностью и идеологией:

$$U = \int \frac{F_1(q) F_2(q)}{q^2} d^3 q,$$

где $F_1(q)$ и $F_2(q)$ – Фурье-образы, q – волновой вектор, U – энергия взаимодействия.

В случае со структурной биологией все это может оказаться необходимым, поскольку вычисления в координатном представлении по огромному числу частиц и вариантов взаимного расположения требуют больших вычислительных мощностей даже при низкой точности, что чаще всего приводит к неустойчивым решениям.

Отметим, что Фурье-анализ в структурной биологии применяется либо исключительно для ускорения расчетов, либо для получения формальных пространственных характеристик в рамках задач сравнительного анализа. Данное разложение по таким специальным функциям позволяет перейти к некоторому аналогу дискретного Фурье-преобразования, который ограничен в силу отсутствия представления об атомарном устройстве макромолекул, для которого можно применять некоторые обобщения быстрых Фурье-преобразований с целью быстрого пересмотра различных взаимных расположений. Использование коэффициентов разложения для примерной оценки корреляции дает возможность получить альтернативный инструмент, к примеру, для избирательной молекулярной стыковки, сравнимый по времени и качеству с подходами, основанными на координатном представлении, но при неизбежной потере наглядности. Просматриваются перспективы конструирования из этих коэффициентов поворотных инвариантов с целью «картографирования» молекулярных поверхностей опять же с потерей наглядности.

В связи с этим речь больше идет о задаче схожести и определении возможного взаимодействия по подобию.

Формулирование задач о трехмерном меж- и внутримолекулярном взаимодействиях в случае биомакромолекул со степенями и иерархиями регулярностей, а также о соответствии структурированных частей и целого может быть реальным в более общем Фурье-анализе с учетом атомарного устройства, локальных конформаций и укладки цепей.

Для демонстрации математических приемов, возникающих в таких задачах, рассмотрим пример поиска оптимального наложения атомарных структур. Самый простой вариант решения задачи – использование представления атомов как сфер различных радиусов. Фурье-образ от сферы, согласно соотношениям (1) и (2), имеет вид:

$$\begin{aligned}
 F(k_r, k_\theta, k_\varphi) &= \\
 &= \int_0^R r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{2\pi i r k (\cos \theta \cos k_\theta + \sin \theta \sin k_\theta \cos(\varphi - k_\varphi))} d\varphi = 2\pi \int_0^R \frac{J_{1/2}(2\pi r k)}{\sqrt{kr}} r^2 dr = \\
 &= J_{3/2}(2\pi R k) \left(\frac{R}{k}\right)^{3/2}, \tag{3}
 \end{aligned}$$

где R – радиус сферы, k – длина волнового вектора. Фурье-образ ансамбля сфер с использованием суммирования векторов можно представить как

$$F(\vec{k}) = \sum_n e^{-2\pi i \vec{k} \vec{r}_n} J_{3/2}(2\pi k R_n) \left(\frac{R_n}{k}\right)^{3/2}, \tag{4}$$

где R_n – радиус n -го атома, \vec{r}_n – вектор к центру n -го атома, \vec{k} – волновой вектор. При этом выполнять преобразование, соответствующее параллельному переносу в сферических системах координат (ССК), можно по следующим выражениям:

$$R' = \sqrt{R^2 + R_t^2 - 2RR_t (\sin \theta \sin \theta_t \cos(\varphi - \varphi_t) + \cos \theta \cos \theta_t)},$$

$$\tan \varphi' = \frac{R_t \sin \varphi_t - R \sin \varphi}{R_t \cos \varphi_t - R \cos \varphi},$$

$$(R' \cos \theta')^2 = (R \cos \theta - R_t \cos \theta_t)^2,$$

где (R, θ, φ) – исходные координаты в ССК, $(R_t, \theta_t, \varphi_t)$ – координаты вектора переноса, (R', θ', φ') – новые координаты.

Согласно аналогу теоремы о свертке в Фурье-анализе [11, гл. 6], пространственная корреляция двух атомарных структур может быть представлена через их Фурье-образы:

$$K(\vec{r}') = \int f_1^*(\vec{r}) f_2(\vec{r} + \vec{r}') \overline{d\vec{r}} = \int F_1^*(\vec{k}) F_2(\vec{k}) e^{2\pi i \vec{k} \vec{r}'} \overline{d\vec{k}}.$$

С учетом (4) при использовании двойного интеграла Гегенбауэра типа Пуассона [8, гл. 3.33], получим

$$\begin{aligned}
 K(r') &= \sum_n \sum_m \int_0^\infty dk k^2 J_{3/2}(2\pi k R_n) \left(\frac{R_n}{k}\right)^{3/2} J_{3/2}(2\pi k R_m) \left(\frac{R_m}{k}\right)^{3/2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin k_\theta e^{-2\pi i \vec{k} (\vec{r}_m - \vec{r}_n - \vec{r}')} dk_\varphi dk_\theta = \\
 &= 2\pi \sum_n \sum_m \int_0^\infty dk k^2 J_{3/2}(2\pi k R_n) \left(\frac{R_n}{k}\right)^{\frac{3}{2}} J_{3/2}(2\pi k R_m) \left(\frac{R_m}{k}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{J_1\left(2\pi k \left|\vec{r}_m - \vec{r}_n - \vec{r}'\right|\right)}{\left(k \left|\vec{r}_m - \vec{r}_n - \vec{r}'\right|\right)^{1/2}}, \tag{5}
 \end{aligned}$$

где \vec{r}_n – радиус-вектор к n -му атому первой структуры, \vec{r}_m – радиус-вектор к m -му атому второй структуры, R_n, R_m – радиусы сфер, представляющих эти атомы, k, k_θ, k_φ – координаты волнового вектора в ССК. Подынтегральное выражение в (5) содержит три функции Бесселя. Произведение двух функций Бесселя одного порядка можно преобразовать, согласно интегралу, полученному в [8, гл. 11.41]:

$$\int_0^\pi \frac{C_\nu \left\{ \sqrt{Z^2 + z^2 - 2Zz \cos \varphi} \right\}}{(Z^2 + z^2 - 2Zz \cos \varphi)^{1/2\nu}} \sin^{2\nu} \varphi d\varphi = 2^\nu \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \frac{C_\nu(Z) J_\nu(z)}{Z^\nu z^\nu}, \quad (6)$$

где C_ν – произвольная цилиндрическая функция, Γ – гамма-функция. Подставляя (6) в (5) и меняя порядок интегрирования, получим

$$K(r') = \sum_n \sum_m 2\pi^2 R_n^3 R_m^3 \int_0^\pi \sin^3 \varphi d\varphi \int_0^\infty dk \cdot k^2 \frac{J_{\frac{3}{2}}\left(2\pi k \sqrt{R_n^2 + R_m^2 - 2R_n R_m \cos \varphi}\right) J_{\frac{1}{2}}(2\pi k R_{nm})}{\left(k \sqrt{R_n^2 + R_m^2 - 2R_n R_m \cos \varphi}\right)^{3/2} (k R_{nm})^{1/2}}, \quad (7)$$

где $R_{nm} = |\vec{r}_m - \vec{r}_n - \vec{r}'|$. Несобственный интеграл по k в (7) является вариантом частного случая разрывного интеграла [8, гл. 13.42]:

$$\int_0^\infty J_\nu(at) J_{\nu-1}(bt) dt = \begin{cases} \frac{b^{\nu-1}}{a^\nu}, & b < a, \\ \frac{1}{2b}, & b = a, \\ 0, & b > a. \end{cases}$$

В результате искомая пространственная корреляция приводится к следующему виду:

$$K(\vec{r}') = \sum_n \sum_m \pi R_n^3 R_m^3 \int_{\Theta} \frac{\sin^3 \varphi}{\left(\sqrt{R_n^2 + R_m^2 - 2R_n R_m \cos \varphi}\right)^3} d\varphi, \quad (8)$$

где Θ – пересечение отрезка $[0, \pi]$ и области, в которой выполняется условие

$$\sqrt{R_n^2 + R_m^2 - 2R_n R_m \cos \varphi} < R_{nm},$$

если таковая есть.

Последний интеграл в (8) берется при замене переменной интегрирования φ на $\cos \varphi$. Подобное выражение, вероятно, возможно получить и без применения Фурье-анализа – через перекрывающиеся объемы сферических сегментов при наложении структур. С другой стороны, для более сложных задач (к примеру, поиска экстремумов корреляции или в случае представления атомарных плотностей более сложными комбинациями сферических функций) продемонстрированный подход явно предпочтительнее.

В заключение отметим, что простота преобразований Фурье-образов, соответствующих трансляционным смещениям в пространстве координат, наличие ротационных инвариантов, таких как характеры неприводимых представлений групп вращений и функций, зависящих от угла между векторами и разлагаемых по биполярным гармоникам, обеспечивает высокие вычислительные преимущества использования сферических функций и Фурье-объектов в задачах, для которых «узким местом» является взаимное расположение взаимодействующих объектов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Математический аппарат, включающий Фурье преобразование (разложение по плоским волнам с использованием сферических координат), позволяющий одновременно исследовать сложные перемещения, в том числе повороты и смещения, в сложных молекулярных конструкциях / А. В. Батяновский [и др.] // Биофизика. – 2019. – Т. 64, № 2. – С. 239–242. <https://doi.org/10.1134/s0006302919020030>
2. A Fourier analysis of symmetry in protein structure / W. R. Taylor [et al.] // *Protein Engineering, Design and Selection*. – 2002. – Vol. 15, № 2. – P. 79–89. <https://doi.org/10.1093/protein/15.2.79>
3. SaberiFathi, S. M. Geometrical comparison of two protein structures using Wigner-D functions / S. M. SaberiFathi, D. T. White, J. A. Tuszynski // *Proteins*. – 2014. – Vol. 82, № 10. – P. 2756–2769. <https://doi.org/10.1002/prot.24640>
4. Mavridis, L. 3D-blast: 3D protein structure alignment, comparison, and classification using spherical polar Fourier correlations / L. Mavridis, D. W. Ritchie // *Pacific Symposium on Biocomputing 2010: proc. Int. conf.* – Hawaii, 2010. – P. 281–292. https://doi.org/10.1142/9789814295291_0030
5. PIPER: an FFT-based protein docking program with pairwise potentials / D. Kozakov [et al.] // *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*. – 2006. – Vol. 65, № 2. – P. 392–406. <https://doi.org/10.1002/prot.21117>
6. The ClusPro web server for protein-protein docking / D. Kozakov [et al.] // *Nature Protocols*. – 2017. – Vol. 12, № 2. – P. 255–278. <https://doi.org/10.1038/nprot.2016.169>
7. Bajaj, C. F2Dock: fast Fourier protein-protein docking / C. Bajaj, R. Chowdhury, V. Siddavanahalli // *IEEE/ACM Trans. Comput. Biol. Bioinformatics*. – 2011. – Vol. 8, № 1. – P. 45–58. <https://doi.org/10.1109/tcbb.2009.57>
8. Watson, G. N. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions* / G. N. Watson. – Cambridge: University press, 1922. – 804 p.
9. Qing Wang. *Fourier Analysis in Polar and Spherical Coordinates* [Electronic resource] / Qing Wang, O. Ronneberger, H. Burkhardt. – 2008. – Mode of access: https://lmb.informatik.uni-freiburg.de/Publications/2008/WRB08/wa_report01_08.pdf. – Date of access: 23.07.2019.
10. Radial functions and the Fourier transform [Electronic resource] // *Notes for Math 583A* (2008). – Mode of access: <https://www.math.arizona.edu/~faris/methodsweb/hankel.pdf>. – Date of access: 23.07.2019.
11. Bracewell, R. N. *The Fourier Transform and Its Applications* / R. N. Bracewell. – McGraw-Hill, 2000. – 640 p.

References

1. Batyanovskii A. V., Namiot V. A., Filatov I. V., Esipova N. G., Volotovskii I. D. A Mathematical Approach to Includes the Fourier Transform (Plane Wave sDecomposition Using Spherical Coordinates) for the Study of Simultaneously Complex Movements in Particular Rotations and Displacements in Complicated Molecular Constructions. *Biofizika = Biophysics*, 2019, vol. 64, no. 2, pp. 239–242 (in Russian). <https://doi.org/10.1134/s0006302919020030>
2. Taylor W. R., Heringa J., Baud F., Flores T. P. A Fourier analysis of symmetry in protein structure. *Protein Engineering, Design and Selection*, 2002, vol. 15, no. 2, pp. 79–89. <https://doi.org/10.1093/protein/15.2.79>
3. SaberiFathi S. M., White D. T., Tuszynski J. A. Geometrical comparison of two protein structures using Wigner-D functions. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 2014, vol. 82, no. 10, pp. 2756–2769. <https://doi.org/10.1002/prot.24640>
4. Mavridis L., Ritchie D. W. 3D-blast: 3D protein structure alignment, comparison, and classification using spherical polar Fourier correlations. *Proceedings international conference "Pacific Symposium on Biocomputing 2010"*. Hawaii, 2010, pp. 281–292. https://doi.org/10.1142/9789814295291_0030
5. Kozakov D., Brenke R., Comeau S. R., Vajda S. PIPER: an FFT-based protein docking program with pairwise potentials. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 2006, vol. 65, no. 2, pp. 392–406. <https://doi.org/10.1002/prot.21117>
6. Kozakov D., Hall D. R., Bing Xia, Porter K. A., Padhorny D., Yueh C., Beglov D., Vajda S. The ClusPro web server for protein-protein docking. *Nature Protocols*, 2017, vol. 12, no. 2, pp. 255–278. <https://doi.org/10.1038/nprot.2016.169>
7. Bajaj C., Chowdhury R., Siddavanahalli V. F2Dock: fast Fourier protein-protein docking. *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, 2011, vol. 8, no. 1, pp. 45–58. <https://doi.org/10.1109/tcbb.2009.57>
8. Watson G. N. *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge, The University Press, 1922. 804 p.
9. Qing Wang, Ronneberger O., Burkhardt H. *Fourier Analysis in Polar and Spherical Coordinates*. Technical Report 1, *IF-LMB, Computer Science Department, University of Freiburg* (2008). Available at: https://lmb.informatik.uni-freiburg.de/Publications/2008/WRB08/wa_report01_08.pdf (accessed 23.07.2019).
10. Radial functions and the Fourier transform. *Notes for Math 583A* (2008) Available at: <https://www.math.arizona.edu/~faris/methodsweb/hankel.pdf> (accessed 23.07.2019).
11. Bracewell R. N. *The Fourier Transform and Its Applications*. McGraw-Hill, 2000. 640 p.

Приложение

Исходим из частного случая $\nu = 1/2$ гегенбауэровского обобщения интеграла Пуассона [8, гл. 3.32]:

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \int_0^\pi e^{iz\cos(\varphi)} P_n(\cos(\varphi)) \sin(\varphi) d\varphi, \quad (\text{П.1})$$

где $J_{n+1/2}(z)$ – функция Бесселя полуцелого порядка, $P_n(x)$ – полином Лежандра.

Первая часть доказательства проведена подобно тому, как в [8, гл. 3.33] проводится доказательство двойного интеграла Гегенбауэра типа Пуассона. Рассмотрим очевидное следствие интеграла (П.1):

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^3}} \int_0^\pi e^{iz\cos(\theta)} P_n(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta \int_0^\pi \sin^0(\varphi) d\varphi, \quad (\text{П.2})$$

где \sin в нулевой степени записан для согласования с доказательством в указанном источнике.

На следующем шаге, рассматривая угловые координаты как широту и долготу, с переходом в декартову систему координат, обозначив направляющие косинусы вектора интегрирования как

$$[L = \cos(\varphi)\sin(\theta), M = \sin(\varphi)\sin(\theta), N = \cos(\theta)]$$

и учитывая, что элемент поверхности

$$d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi,$$

приводим (П.2) к следующему виду:

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{1}{\pi} \iint_{M \geq 0} e^{izN} P_n(N) M^0 d\Omega.$$

Проведя циклическую перестановку орт, получим

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{1}{\pi} \iint_{N \geq 0} e^{izL} P_n(L) N^0 d\Omega$$

или

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos \varphi \sin \theta} P_n(\cos \varphi \sin \theta) \sin \theta d\varphi d\theta. \quad (\text{П.3})$$

С учетом того, что в (П.3) один из интегралов охватывает полный период подынтегральной функции по координате φ , можем поступить так:

$$J_{n+1/2}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi}} \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} e^{iz \cos(\varphi - k_0) \sin(\theta)} P_n(\cos(\varphi - k_0) \sin(\theta)) \sin(\theta) d\varphi d\theta,$$

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} e^{iz(\cos \varphi \cos k_0 - \sin \varphi \sin k_0) \sin \theta} P_n((\cos \varphi \cos k_0 - \sin \varphi \sin k_0) \sin \theta) \sin \theta d\varphi d\theta. \quad (\text{П.4})$$

Снова повторяя предыдущие операции по циклической перестановке орт, получим

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \iint_{N \geq 0} e^{iz(L \cos k_0 - M \sin k_0)} P_n(L \cos k_0 + M \sin k_0) d\Omega,$$

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \iint_{M \geq 0} e^{iz(N \cos k_0 - L \sin k_0)} P_n(N \cos k_0 + L \sin k_0) d\Omega,$$

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \int_0^\pi \int_0^\pi e^{iz(\cos \theta \cos k_0 + \sin \theta \sin k_0 \cos \varphi)} P_n(\cos \theta \cos k_0 + \sin \theta \sin k_0 \cos \varphi) \sin(\theta) d\varphi d\theta. \quad (\text{П.5})$$

Воспользуемся на данном этапе теоремой суммирования сферических гармоник, точнее, следующей ее видом:

$$P_n(\cos\theta_1 \cos\theta_2 + \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi) = \sum_{m=-n}^n (-1)^m P_n^{-m}(\cos\theta_1) P_n^m(\cos\theta_2) \cos(m\varphi), \quad (\text{П.6})$$

где P_n^m – обобщенный полином Лежандра

В итоге можно записать выражение (П.6) как

$$J_{n+\frac{1}{2}}(z) = (-i)^n \sqrt{\frac{z}{2\pi^2}} \int_0^\pi \int_0^\pi e^{iz(\cos\theta \cos k_0 + \sin\theta \sin k_0 \cos\varphi)} \sum_{m=-n}^n (-1)^m P_n^{-m}(\cos\theta) P_n^m(\cos k_0) \cos(m\varphi) \sin(\theta) d\varphi d\theta. \quad (\text{П.7})$$

Вынося суммирование и множители, содержащие независимые переменные, за знак интеграла, и используя формулу Эйлера, получаем соотношение (2) основного текста.

Информация об авторах

Батяновский Александр Валерьевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт биофизики и клеточной инженерии Национальной академии наук Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: alexandersn@ibp.org.by

Намиот Владимир Абрамович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, (ул. Ленинские Горы, 1с2, 119991, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: vnamiot@gmail.ru

Филатов Иван Васильевич – кандидат физико-математических наук, преподаватель, Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет) (Институтский пер., 9, 141701, г. Долгопрудный, Российская Федерация). E-mail: ivfilatov@mail.ru

Туманян Владимир Гайевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией вычислительных методов системной биологии, Институт молекулярной биологии им. В. А. Энгельгардта Российской академии наук (ул. Вавилова, 32, 117984, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: tuman@eimb.ru

Есипова Наталья Георгиевна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт молекулярной биологии им. В. А. Энгельгардта Российской академии наук (ул. Вавилова, 32, 117984, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: nge.@eimb.ru

Волотовский Игорь Дмитриевич – академик Национальной академии наук Беларуси, доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией молекулярной биологии клетки, Институт биофизики и клеточной инженерии Национальной академии наук Беларуси (ул. Академическая, 27, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: volot@biobel.bas-net.by

Information about the authors

Alexander V. Batyanovskii – Ph. D. (Physics and Mathematics), Researcher, Institute of Cell Biophysics and Cell Technology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexandersn@ibp.org.by

Vladimir A. Namiot – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Lomonosov Moscow State University (1/2, Leninskie Gory, 119991, Moscow, Russian Federation). E-mail: vnamiot@gmail.ru

Ivan V. Filatov – Ph. D. (Physics and Mathematics), Teacher, Moscow Institute of Physics and Technology (9, Institutskii Lane, Dolgoprudny, 141701, Moscow Region, Russian Federation). E-mail: ivfilatov@mail.ru

Vladimir G. Tumanyan – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Laboratory of Computational Methods for System Biology, Engelhard Institute of Molecular Biology of the Russian Academy of Sciences (32, Vavilov Str., 119991, Moscow, Russian Federation). E-mail: tuman@eimb.ru

Natalia G. Esipova – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Engelhard Institute of Molecular Biology of the Russian Academy of Sciences (32, Vavilov Str., 119991, Moscow, Russian Federation). E-mail: nge.@eimb.ru

Igor D. Volotovskiy – Academician of the National Academy of Sciences of Belarus, Dr. Sc. (Biology), Professor, Head of the Laboratory of Molecular Cell Biology, Institute of Cell Biophysics and Cell Technology of the National Academy of Sciences of Belarus (27, Akademicheskaya Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: volot@biobel.bas-net.by

УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ
SCIENTISTS OF BELARUS

НИКОЛАЙ СТАНИСЛАВОВИЧ КАЗАК

(К 75-летию со дня рождения)

29 октября 2020 г. исполнилось 75 лет со дня рождения известного ученого в области кристаллооптики, нелинейной оптики и лазерной физики, академика Национальной академии наук Беларуси, доктора физико-математических наук, заслуженного деятеля науки Республики Беларусь, лауреата Государственной премии Республики Беларусь Н. С. Казака.

Николай Станиславович родился в деревне Дешенка Узденского района Минской области в крестьянской семье. В 1961 г. с отличием окончил среднюю школу, в 1966 г. – физический факультет Белорусского государственного университета. Получив распределение в Институт физики АН БССР, начал активно работать в области нелинейной оптики – изучать процессы частотного преобразования лазерного излучения в кристаллах, принимать участие в разработке и создании методов и устройств, позволяющих увеличить эффективность преобразования. Наиболее важным результатом защищенной в 1975 г. кандидатской диссертации стало создание источников мощного лазерного излучения в области 220–400 нм с плавной перестройкой частоты. За исследования в области нелинейно-частотного преобразования в 1978 г. Н. С. Казак удостоен премии Ленинского комсомола Беларуси.

В 1979 г. Н. С. Казак был назначен на должность ученого секретаря, в 1988 г. – заместителя директора по научной работе, в 1998 г. – директора Института физики НАН Беларуси. В 2000 г. Николай Станиславович был избран членом-корреспондентом, в 2003 г. – академиком НАН Беларуси.

С 2002 по 2004 г. Н. С. Казак являлся академиком-секретарем Отделения физики, математики и информатики НАН Беларуси. С 2004 по 2008 г. – главный ученый секретарь НАН Беларуси. На протяжении 2002–2014 гг. был членом Президиума НАН Беларуси.

С 2008 по 2012 г. являлся заместителем председателя Постоянной комиссии по образованию, культуре, науке и научно-техническому прогрессу Палаты представителей Национального собрания Республики Беларусь.

С 2014 по 2019 г. Николай Станиславович выполнял обязанности и. о. директора Института физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси. За это время Институт превратился в научно-производственный центр с оптическим и механическим производством. В результате осуществленной масштабной перестройки созданы условия для разработки и изготовления оптического и лазерно-оптического оборудования и приборов мирового уровня. Среди них лидарная станция контейнерного типа для работы в условиях Антарктиды; CO₂-лазерная система для дистанционного газоанализа; установка для испытания источников ультрафиолетового излучения; Национальный эталон единиц спектральной плотности, энергетической яркости и других параметров источников света; Национальный эталон единицы поляризационной модовой дисперсии в оптических волокнах; лазерно-оптический анализатор дефектов на поверхности полупроводниковых и диэлектрических пластин; двухкристальный гамма-спектрометр с улучшенным энергетическим разрешением; установка контроля температурных полей СВЧ монолитных ин-



тегральных схем; установка для контроля формы волнового фронта и пространственных характеристик излучения.

С мая 2019 г. Николай Станиславович возглавляет Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника». Под его руководством создан успешно работающий инновационно-промышленный кластер «Микро-, опто- и СВВ-электроника».

При всей своей занятости научно-организационными делами на всех этапах жизненного пути Н. С. Казак остается в первую очередь активным исследователем. Выполнены исследования нелинейного преобразования излучения лазеров в различных кристаллах и геометриях эксперимента с учетом реальных параметров лазерного излучения. Создан ряд высокоэффективных нелинейно-оптических преобразователей частоты и других параметров излучения лазеров различных типов. С помощью преобразования частоты лазеров на красителях получено мощное плавно перестраиваемое УФ-излучение, предсказан нелинейно-оптический эффект генерации переменного электрического поля. Реализован метод «нелинейного зеркала» для управления спектральными, временными и пространственными параметрами излучения сложных лазерных систем. Разработаны нелинейно-оптические методы измерения параметров лазерного излучения и вещества в УФ- и ИК-диапазонах, метод пассивной абсорбционной спектроскопии, схемы ИК-спектрометров с высокой спектральной яркостью на основе внутривибрационной ап-конверсии, способы управления ультразвуковыми пучками. Изучено распространение световых и ультразвуковых волн вблизи особых направлений в кристалле и созданы способы управления пространственными параметрами этих волн.

Под руководством Н. С. Казака выполнен ряд приоритетных работ по исследованию закономерностей преобразования бесселевых световых пучков линейными и нелинейными кристаллами. Показана возможность рождения и аннигиляции оптических вихрей при нелинейно-частотном преобразовании этих пучков. Предсказан и экспериментально реализован новый тип фазового синхронизма (полный конический синхронизм) для генерации второй гармоники векторных бесселевых пучков в одноосных кристаллах. Реализован метод формирования бесселевых пучков высших порядков и пучков с дислокацией волнового фронта с использованием двуосных кристаллов. Предсказан и исследован новый тип квазибездифракционных поверхностных плазмон-поляритонов в многослойных металлодиэлектрических структурах. Исследована пространственная динамика спин-орбитального преобразования углового момента бесселевых световых пучков в кристаллах. Под руководством и при непосредственном участии ученого на основе бесселевых пучков разработан и создан ряд новых интерферометрических, спектрометрических и томографических методов и устройств оптической диагностики и неразрушающего контроля различных объектов и материалов. На этой основе создан ряд компактных профилометров, отличающихся высокой виброустойчивостью. Разработаны принципиально новые методы оптического неразрушающего контроля, которые позволяют осуществлять оперативную диагностику качества сильно рассеивающих материалов. Созданы уникальные оптические зонды и бесселевы лазерные пинцеты для манипуляции микро- и наночастицами.

В последние годы под руководством Н. С. Казака выполнены фундаментальные исследования в рамках активно развивающегося междисциплинарного направления – оптические метаматериалы. На основе гиперболических метаматериалов предложены и реализованы новые конфигурации плоских линз с субволновым разрешением ближнего и дальнего поля.

Н. С. Казак является автором более 540 научных трудов, в том числе 79 авторских свидетельств и патентов.

Большое внимание уделяет ученой работе с молодежью, подготовке нового поколения исследователей. Под его руководством защищено пять кандидатских и одна докторская диссертация.

Достижения Н. С. Казака отмечены Государственной премией Республики Беларусь (2000), орденом Франциска Скорины (2002), орденом Почета (2012), золотой медалью НАН Беларуси «За большой вклад в развитие науки» (2015). Н. С. Казаку присвоено почетное звание «Ученый года НАН Беларуси-2018».

Говоря о Н. С. Казаке – ученом, невозможно не сказать о Николае Станиславовиче – человеке. Вызывает глубокое уважение его активная жизненная позиция, высокие моральные качества, житейская мудрость, принципиальность, доброжелательность и оптимизм. Неоценим вклад Николая Станиславовича в дело развития Института физики НАН Беларуси в традициях демократичности и требовательности, что стало залогом поддержания здоровой творческой атмосферы в коллективе и основой всех его достижений.

Коллеги и друзья от всего сердца поздравляют Николая Станиславовича с замечательным юбилеем и желают ему крепкого здоровья и успехов во всех начинаниях.

*Отделение физики, математики и информатики НАН Беларуси,
Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси,
ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника»,
Белорусское физическое общество*

**ПЕРЕЧЕНЬ СТАТЕЙ, ОПУБЛИКОВАННЫХ В ЖУРНАЛЕ
«ВЕСЦІ НАЦЫЯНАЛЬНАЙ АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ.
СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК»
В 2020 ГОДУ**

МАТЕМАТИКА

Айрян Э. А., Гнатич М., Малютин В. Б. Приближенное вычисление функциональных интегралов, порожденных релятивистским гамильтонианом.....	Т. 56, № 1. С. 72–83
Бабич Е. Р., Мартынов И. П. Первые интегралы и рациональные решения некоторых дифференциальных уравнений четвертого порядка.....	Т. 56, № 3. С. 318–327
Басик А. И., Грицук Е. В., Грицук Т. А. Задача Римана – Гильберта для эллиптических систем ортогонального типа в \mathbf{R}^3	Т. 56, № 1. С. 7–16
Бенедиктович В. И. Аналог гипотезы Брауэра для беззнакового лапласиана кографов.....	Т. 56, № 3. С. 310–317
Бенедиктович В. И. Главные собственные значения графа и его гамильтоновость ...	Т. 56, № 4. С. 398–407
Васьковский М. М. Стохастические дифференциальные уравнения смешанного типа со стандартными и дробными броуновскими движениями с индексами Херста, большими $1/3$	Т. 56, № 1. С. 36–50
Говорушко И. О., Янчевский В. И. О классификации конечномерных гензелевых простых центральных алгебр с унитарными инволюциями.....	Т. 56, № 2. С. 135–143
Гринь А. А. Функции Дюлака – Черкаса для систем, эквивалентных уравнению ван дер Поля.....	Т. 56, № 3. С. 275–286
Деменчук А. К. Достаточное условие неразрешимости задачи управления асинхронным спектром линейных почти периодических систем с диагональным усреднением коэффициентной матрицы.....	Т. 56, № 4. С. 391–397
Деменчук А. К. О сильно нерегулярных периодических решениях линейного неоднородного дискретного уравнения первого порядка.....	Т. 56, № 1. С. 30–35
Зверович Э. И., Павловский В. А. Нахождение областей сходимости и вычисление сумм степенных рядов от h -комплексного переменного.....	Т. 56, № 2. С. 189–193
Игнатенко М. В., Янович Л. А. О точном и приближенном решениях отдельных дифференциальных уравнений с вариационными производными первого и второго порядков.....	Т. 56, № 1. С. 51–71
Корзюк В. И., Наумовец С. Н., Сериков В. П. Смешанная задача для одномерного волнового уравнения с условиями сопряжения и производными второго порядка в граничных условиях.....	Т. 56, № 3. С. 287–297
Кушнеров А. В., Липницкий В. А., Королева М. Н. Свойства и параметры обобщенных кодов Боуза – Чоудхури – Хоквингема.....	Т. 56, № 2. С. 157–165
Малютин В. Б., Нуржанов Б. О. Квазиклассическая аппроксимация функциональных интегралов.....	Т. 56, № 2. С. 166–174
Найденко В. Г. Топология частичной выпуклости.....	Т. 56, № 4. С. 408–410
Прохоров Н. П. Вероятностный и детерминированный аналоги алгоритма Миллера – Рабина для идеалов колец целых алгебраических элементов конечных расширений поля \mathbb{Q}	Т. 56, № 2. С. 144–156
Ровба Е. А., Смотрецкий К. А., Дирвук Е. В. Об одном интерполяционном рациональном процессе Фейера – Эрмита.....	Т. 56, № 3. С. 263–274
Шилин А. П. Гиперсингулярное интегро-дифференциальное уравнение эйлера типа.....	Т. 56, № 1. С. 17–29
Шилин А. П. О решении одного интегро-дифференциального уравнения с сингулярным и гиперсингулярным интегралами.....	Т. 56, № 3. С. 298–309
Штукарь В. Л. Классификация 5-мерных подалгебр 6-мерных нильпотентных алгебр Ли.....	Т. 56, № 2. С. 175–188

ФИЗИКА

- Адамчук Д. В., Ксеневиц В. К., Поклонский Н. А., Ковалев А. И. Особенности адсорбции и десорбции водяных паров на поверхности пленок нестехиометрического диоксида олова..... T. 56, № 1. С. 102–113
- Барбарчик Е. А., Буганов О. В., Замковец А. Д., Тихомиров С. А., Фан Вьет Тип, Фам Хон Мынь. Спектрально-кинетические свойства нестационарного поглощения гибридных наноструктур серебро–фталоцианин меди..... T. 56, № 4. С. 470–479
- Батяновский А. В., Намиот В. А., Филатов И. В., Туманян В. Г., Есипова Н. Г., Волоотовский И. Д. Фурье-преобразование в сферических системах как инструмент решения физических задач структурной биологии..... T. 56, № 4. С. 496–503
- Бояркин О. М., Бояркина Г. Г., Василевская Д. С. Осцилляции трех поколений нейтрино T. 56, № 3. С. 361–372
- Бушинский М. В., Терешко Н. В., Чобот А. Н., Мантыцкая О. С., Федотова В. В., Чобот Г. М., Пастушок С. Н. Упругие, магнитные и электрические свойства кобальтитов $Sr_{1-y}CoO_{3-x}$ в области составов $0,2 \leq y \leq 0,3$ T. 56, № 2. С. 224–231
- Василевская Д. С., Григорьев Д. Н., Дудко И. Г., Иванов В. Л., Казанин В. Ф., Козырев А. Н., Рубан А. А., Рыжененков А. Е., Толмачев С. С., Федотович Г. В., Шемьякин Д. Н., Шёлковий Д. В., Эпштейн Л. Б. Изучение процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ с детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 T. 56, № 4. С. 449–458
- Войнова Я. А., Крылова Н. Г., Овсюк Е. М. Паулиевское приближение для векторной частицы с аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле T. 56, № 4. С. 419–435
- Гончаров В. С., Труханов С. В. Треугольная магнитная структура соединения Mn_3Sb T. 56, № 2. С. 232–238
- Залесский В. Б., Конойко А. И., Кравченко В. М., Кузьмицкая А. С. Амплитудная электрооптическая модуляция излучения последовательностями резонаторов Фабри-Перо..... T. 56, № 2. С. 217–223
- Ивашкевич А. В., Войнова Я. А., Овсюк Е. М., Кисель В. В., Редьков В. М. Частица со спином 3/2: модели Паули – Фирца и Фрадкина, взаимодействие с внешними полями..... T. 56, № 3. С. 350–360
- Ивашкевич А. В., Войнова Я. А., Овсюк Е. М., Кисель В. В., Редьков В. М. Частица со спином 3/2: теория Паули – Фирца, нерелятивистское приближение T. 56, № 3. С. 335–349
- Курочкин Ю. А., Шёлковий Д. В., Боярина И. П. Теорема о центре масс в трехмерных пространствах постоянной кривизны T. 56, № 3. С. 328–334
- Лаврёнов А. Н., Лаврёнов И. А. Скрытая симметрия 16D осциллятора и его 9D кулоновского аналога T. 56, № 2. С. 206–216
- Поклонский Н. А., Деревяго А. Н., Вырко С. А. Локализация внешним магнитным полем электронов на ионах водородоподобных доноров в невырожденных полупроводниках T. 56, № 2. С. 239–252
- Поклонский Н. А., Деревяго А. Н., Вырко С. А. Модель стационарной миграции свободных и прыгающих между акцепторами дырок в кристаллическом полупроводнике T. 56, № 1. С. 92–101
- Поклонский Н. А., Сягло А. И., Вырко С. А., Раткевич С. В., Власов А. Т., Лозовик Ю. Е., Нгуен Нгок Хиеу. Геометрия двухслойного нанорулона из zigzag нанополосок графена и нитрида бора T. 56, № 4. С. 411–418
- Русак Ю. А., Бабичев Л. Ф. Монте-Карло моделирование фазового перехода адроны-КГП в столкновениях тяжелых ионов с помощью партонной модели T. 56, № 1. С. 84–91
- Рябушко А. П., Неманова И. Т., Жур Т. А. Движение системы двух тел и их центра масс в неоднородной среде T. 56, № 2. С. 194–205
- Толкачева Е. А., Маркевич В. П., Мурин Л. И. Локальные колебательные моды вакансионно-кислородных комплексов в кристаллическом кремнии при комнатной температуре..... T. 56, № 4. С. 480–487
- Хило Н. А., Ропот П. И., Петров П. К., Белый В. Н. Световые пучки бесселева типа, формируемые двухкомпонентной схемой из аксикона и сферической линзы..... T. 56, № 3. С. 373–383
- Чулков Р. В., Корожан О. П., Орлович В. А. Статистика флуктуаций энергий импульсов генерации твердотельного лазера на вынужденном комбинационном рассеянии . T. 56, № 4. С. 459–469

Шершень И. А., Шишкина Т. В. Современные методы расчета тормозного излучения в процессах взаимодействия элементарных частиц..... Т. 56, № 4. С. 436–448

Якушевич А. С., Богатырев Ю. В., Василенков Н. А., Грабчиков С. С., Ластовский С. Б., Максимов А. Ю. Ослабление потоков электронов радиационных поясов Земли защитными экранами на основе композита W-Cu..... Т. 56, № 4. С. 488–495

ИНФОРМАТИКА

Соболевский П. И., Баханович С. В. Анализ глобальных зависимостей в гексагональном тайлинге..... Т. 56, № 1. С. 114–126

УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ

Изобов Николай Алексеевич (К 80-летию со дня рождения)..... Т. 56, № 1. С. 127–128

Казак Николай Станиславович (К 75-летию со дня рождения)..... Т. 56, № 4. С. 504–506

Комаров Фадей Фадеевич (К 75-летию со дня рождения)..... Т. 56, № 3. С. 384

Корзюк Виктор Иванович (К 75-летию со дня рождения)..... Т. 56, № 2. С. 253–254

Олехнович Николай Михайлович (К 85-летию со дня рождения)..... Т. 56, № 2. С. 255–256

LIST OF PUBLICATIONS FOR 2020
IN “PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS.
PHYSICS AND MATHEMATICS SERIES”

MATHEMATICS

- Ayryan E. A., Hnatic M., Malyutin V. B.** Approximate evaluation of functional integrals generated by the relativistic Hamiltonian..... Vol. 56, no. 1, pp. 72–83
- Babich E. R., Martynov I. P.** The first integrals and rational solutions of some fourth-order differential equations..... Vol. 56, no. 3, pp. 318–327
- Basik A. I., Hrytsuk E. V., Hrytsuk T. A.** The Riemann – Hilbert boundary value problem for elliptic systems of the orthogonal type in \mathbf{R}^3 Vol. 56, no. 1, pp. 7–16
- Benediktovich V. I.** Analogue of Brauer’s conjecture for the signless Laplacian of cographs..... Vol. 56, no. 3, pp. 310–317
- Benediktovich V. I.** Main eigenvalues of a graph and its Hamiltonicity..... Vol. 56, no. 4, pp. 398–407
- Demenchuk A. K.** A sufficient condition for the unsolvability of the control problem of the asynchronous spectrum of linear almost periodic systems with the diagonal averaging of the coefficient matrix..... Vol. 56, no. 4, pp. 391–397
- Demenchuk A. K.** On strongly irregular periodic solutions of the linear nonhomogeneous discrete equation of the first order Vol. 56, no. 1, pp. 30–35
- Govorushko I. O., Yanchevskii V. I.** On the classification of finite-dimensional Henselian simple central algebras with unitary involutions..... Vol. 56, no. 2, pp. 135–143
- Hryn A. A.** Dulac – Cherkas functions for systems equivalent to the van der Pol equation.. Vol. 56, no. 3, pp. 275–286
- Ignatenko M. V., Yanovich L. A.** On the exact and approximate solutions of several differential equations with variational derivatives of the first and second orders..... Vol. 56, no. 1, pp. 51–71
- Korzyuk V. I., Naumavets S. N., Serikov V. P.** Mixed problem for a one-dimensional wave equation with conjugation conditions and second-order derivatives in boundary conditions Vol. 56, no. 3, pp. 287–297
- Kushnerov A. V., Lipinski V. A., Koroliova M. N.** The properties and parameters of generic Bose – Chaudhuri – Hocquenghem codes..... Vol. 56, no. 2, pp. 157–165
- Malyutin V. B., Nurjanov B. O.** Semiclassical approximation of functional integrals..... Vol. 56, no. 2, pp. 166–174
- Naidenko V. G.** Topology of directional convexity..... Vol. 56, no. 4, pp. 408–410
- Prochorov N. P.** Probabilistic and deterministic analogues of the Miller – Rabin algorithm for ideals of rings of integer algebraic elements of finite extensions of the field \mathbb{Q} Vol. 56, no. 2, pp. 144–156
- Rouba Y. A., Smatrytski K. A., Dirvuk Y. V.** On one interpolating rational process of Fejer – Hermite..... Vol. 56, no. 3, pp. 263–27
- Shilin A. P.** A hypersingular integro-differential equation of the Euler type Vol. 56, no. 1, pp. 17–29
- Shilin A. P.** On the solution of one integro-differential equation with singular and hypersingular integrals..... Vol. 56, no. 3, pp. 298–309
- Shtukar U. L.** Classification of 5-dimensional subalgebras for 6-dimensional nilpotent Lie algebras..... Vol. 56, no. 2, pp. 175–188
- Vas’kovskii M. M.** Mixed-type stochastic differential equations driven by standard and fractional Brownian motions with Hurst indices greater than $1/3$ Vol. 56, no. 1, pp. 36–50
- Zverovich E. I., Pavlovsky V. A.** Finding the areas of convergence and calculating the sums of power series of an h -complex variable..... Vol. 56, no. 2, pp. 189–193

PHYSICS

- Adamchuck D. V., Ksenevich V. K., Poklonski N. A., Kavaleu A. I.** Features of water vapor adsorption and desorption on the surface of non-stoichiometric tin dioxide films..... Vol. 56, no. 1, pp. 102–113

- Barbarchyk K. A., Buganov O. V., Zamkovets A. D., Tikhomirov S. A., Phung Viet Tiep, Pham Hong Minh.** Spectral-kinetic properties of transient absorption of hybrid silver–copper phthalocyanine nanostructures Vol. 56, no. 4, pp. 470–479
- Batyanovskii A. V., Namiot V. A., Filatov I. V., Tumanyan V. G., Esipova N. G., Volotovskiy I. D.** Fourier transform in spherical systems as a tool of structural biology Vol. 56, no. 4, pp. 496–503
- Boyarkin O. M., Boyarkina G. G., Vasileuskaya D. S.** Oscillations of three generations of neutrinos Vol. 56, no. 3, pp. 361–372
- Bushinsky M. V., Tereshko N. V., Chobot A. N., Mantytskaya O. S., Fedotova V. V., Chobot G. M., Pastushonok S. N.** The elastic, magnetic, and electrical properties of $Sr_{1-y}Y_yCoO_{3-x}$ cobaltites in the composition range $0.2 \leq y \leq 0.3$ Vol. 56, no. 2, pp. 224–231
- Chulkov R. V., Korozhan O. P., Orlovich V. A.** Statistics of pulse energy fluctuations in a solid-state Raman laser Vol. 56, no. 4, pp. 459–469
- Goncharov V. S., Trukhanov S. V.** Triangular magnetic structure of the Mn_3Sb compound Vol. 56, no. 2, pp. 232–238
- Ivashkevich A. V., Voynova Ya. A., Ovsyuk E. M., Kisel V. V., Red'kov V. M.** Spin 3/2 particle: Pauli – Fierz and Fradkin models, interaction with external fields Vol. 56, no. 3, pp. 350–360
- Ivashkevich A. V., Voynova Ya. A., Ovsyuk E. M., Kisel V. V., Red'kov V. M.** Spin 3/2 particle: Pauli – Fierz theory, non-relativistic approximation Vol. 56, no. 3, pp. 335–349
- Khilo N. A., Ropot P. I., Petrov P. K., Belyi V. N.** Bessel-like light beams formed by the two-component scheme consisting of an axicon and a spherical lens Vol. 56, no. 3, pp. 373–383
- Kurochkin Yu. A., Shoukavy Dz. V., Boyurina I. P.** Center mass theorem in three dimensional spaces with constant curvature Vol. 56, no. 3, pp. 328–334
- Lavrenov A. N., Lavrenov I. A.** Hidden symmetry of the 16D oscillator and its 9D coulomb analogue Vol. 56, no. 2, pp. 206–216
- Poklonski N. A., Dzeraviaha A. N., Vyrko S. A.** Localization by an external magnetic field of electrons on the ions of hydrogen-like donors in non-degenerate semiconductors Vol. 56, no. 2, pp. 239–252
- Poklonski N. A., Dzeraviaha A. N., Vyrko S. A.** Model of stationary migration of free and hopping via acceptors holes in a crystalline semiconductor Vol. 56, no. 1, pp. 92–101
- Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Vlassov A. T., Lozovik Yu. E., Hieu Nguyen Ngoc.** The geometry of a bilayer nanoscroll rolled from zigzag nanoribbons of graphene and boron nitride Vol. 56, no. 4, pp. 411–418
- Rusak Yu. A., Babichev L. F.** Monte-Carlo simulation of the 1st order hadron-QGP phase transition in heavy ion collisions using a parton model Vol. 56, no. 1, pp. 84–91
- Ryabushko A. P., Nemanova I. T., Zhur T. A.** The motion of the system of two bodies and their center of mass in an inhomogeneous environment Vol. 56, no. 2, pp. 194–205
- Shershan I. A., Shishkina T. V.** Modern methods of calculations of bremsstrahlung in the interaction of elementary particles Vol. 56, no. 4, pp. 436–448
- Tolkacheva E. A., Markevich V. P., Murin L. I.** Local vibrational modes of vacancy-oxygen-related complexes at room temperature Vol. 56, no. 4, pp. 480–487
- Vasilevskaya D. S., Grigoriev D. N., Dudko I. G., Ivanov V. L., Kazanin V. F., Kozyrev A. N., Ruban A. A., Ryzhenkov A. E., Tolmachev S. S., Fedotov G. V., Shemyakin D. N., Shoukavy Dz. V., Epshteyn L. B.** Study of the process $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ with the CMD-3 detector at the electron-positron collider VEPP-2000 Vol. 56, no. 4, pp. 449–458
- Voynova Ya. A., Krylova N. G., Ovsyuk E. M.** Pauli approximation for a vector particle with anomalous magnetic moment in an external Coulomb field Vol. 56, no. 4, pp. 419–435
- Yakushevich H. S., Bogaturev Y. V., Vasilenkov N. A., Grabchikov S. S., Lastovski S. B., Maksimov A. Y.** Attenuation of Earth's radiation belt electrons with protective shields based on composite W-Cu Vol. 56, no. 4, pp. 488–495
- Zalesski V. B., Konoiko A. I., Kravchenko V. M., Kuzmitskaya H. S.** Amplitude electro-optical modulation of radiation by sequences of Fabry-Perot resonators Vol. 56, no. 2, pp. 217–223

INFORMATICS

- Sobolevsky P. I., Bakhanovich S. V.** Global dependences in hexagonal tiling Vol. 56, no. 1, pp. 114–126

SCIENTISTS OF BELARUS

Izobov Nikolai Alekseevich (To the 80 th Anniversary)	Vol. 56, no. 1, pp. 127–128
Kazak Nikolay Stanislavovich (To the 75 th Anniversary)	Vol. 56, no. 4, pp. 504–506
Komarov Fadey Fadeevich (To the 75 th Anniversary)	Vol. 56, no. 3, pp. 384
Korzyuk Viktor Ivanovich (To the 75 th Anniversary)	Vol. 56, no. 2, pp. 253–254
Olekhovich Nikolai Mikhailovich (To the 85 th Anniversary)	Vol. 56, no. 2, pp. 255–256