

Итоговый семинар
по физике и астрономии
по результатам конкурса грантов
2002 года для молодых ученых
Санкт-Петербурга

3 апреля 2003 г.
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
Санкт-Петербург

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ



Санкт-Петербург, 2003

Организаторы семинара

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН

Конкурсный центр фундаментального естествознания (КЦФЕ)

Министерства образования РФ

Saint-Petersburg Chapter of Lasers and Electro-Optics Society (LEOS)

Организационный комитет

Соколовский Григорий Семенович (ФТИ), *председатель*

Аверкиев Никита Сергеевич (ФТИ)

Азбель Александр Юльевич (КЦФЕ)

Когновицкая Елена Андреевна (ФТИ)

Кучинский Владимир Ильич (ФТИ)

Кучма Анатолий Евдокимович (КЦФЕ)

Попов Алексей Юрьевич (ФТИ)

Портной Ефим Лазаревич (ФТИ, LEOS)

Семинар является одним из заключительных отчетных мероприятий конкурса на соискание персональных грантов для студентов, аспирантов и молодых специалистов Санкт-Петербурга, организованного Администрацией Санкт-Петербурга, Министерством образования РФ и Российской академией наук. Конкурс получил также финансовую поддержку со стороны федеральной целевой программы «Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 2002–2006 годы». Для участия в семинаре были приглашены победители конкурса 2002 года в области физики и астрономии, набравшие высший рейтинг по результатам экспертизы.

Предисловие

В 2002 году в очередной раз проводился конкурс работ студентов, аспирантов и молодых специалистов Санкт-Петербурга. Задача этого конкурса — выявление перспективных научных молодежи и финансовая поддержка лучших работ. Конкурс проводится ежегодно в рамках программы, организованной городской администрацией, Конкурсным центром фундаментального естествознания (КЦФЕ) Министерства образования РФ и Российской академией наук. В отличие от прошлых лет, 2002 году конкурс проводился для двух групп участников. В первой группе, называемой «Дипломные проекты», участвовали студенты старших курсов, а в группе «Кандидатские проекты» — аспиранты и стажеры-исследователи. Подобная структура конкурса, с одной стороны, обеспечила максимальный охват научной молодежи, а, с другой, позволила достаточно гибко осуществлять поддержку наиболее перспективных направлений исследований. Молодые ученые, недавно защитившие кандидатскую диссертацию, участвовали в специализированном конкурсе для данной категории научной молодежи — Конкурсе грантов для молодых кандидатов наук. Данный конкурс, проводившийся впервые, был направлен на поддержку молодых кандидатов наук, проводящих научные исследования в ведущих научно-педагогических коллективах Минобразования России.

Предлагаемый вниманию читателя сборник содержит тезисы докладов победителей конкурса 2002 года, представленных на итоговом семинаре по физике и астрономии. Такие семинары проводятся в шестой раз, начиная с 1997 года. Традиционным местом их проведения является Научно-образовательный центр Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе. Это стало возможным благодаря финансовой поддержке со стороны федеральной целевой программы «Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 2002–2006 годы» (УНЦ № А0152). Проведение семинара в здании Научно-образовательного центра, оборудованном самой современной техникой, дало возможность его участникам — молодым ученым Санкт-Петербурга — воочию убедиться в том, что у Российской науки есть будущее.

В семинаре участвовало более сорока докладчиков из университетов и академических институтов Санкт-Петербурга. В программу включены как экспериментальные, так теоретические работы по оптике, молекулярной физике, физике полимеров, радиофизике, физике плазмы и т.д. Следует отметить высокий уровень представленных работ, свидетельствующий о значительных успехах вузовской и академической молодежи в развитии

своих научных идей. В программу семинара были включены также работы по биофизике. По мнению организаторов, это дало молодым исследователям дополнительную возможность познакомиться с новыми идеями, находящимися на стыке разных областей знаний, и расширить свой научный кругозор. Хорошо известно, что аналитический подход и экспериментальные методики, развитые в физике, успешно проникают в другие точные науки, и наоборот, — задачи из «смежных» областей знаний дают импульс для развития новых направлений физических исследований. В результате возможно слияние, казалось бы, прежде несовместимых научных направлений.

Как и в предыдущие годы, семинар проводился в Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе при финансовой поддержке КЦФЕ. В организации семинара активное участие приняли молодые сотрудники Физтеха, энергия и энтузиазм которых обеспечили успех семинара.

Ученый секретарь
ФТИ им. А. Ф. Иоффе
д. ф.-м. н. Н. С. Аверкиев

Дипломные проекты

Теоретический анализ структурно-функциональных отношений субстратов холинэстераз

Д. А. Белинская, С. Г. Фалькович

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Ацетилхолинэстераза (АХЭ, 3.1.1.7) участвует в проведении нервного импульса, гидролизуя природный нейромедиатор ацетилхолин (АХ) $\text{CH}_3\text{COO}(\text{CH}_2)_2\text{N}^+(\text{CH}_3)_3$. Помимо АХЭ в организмах присутствуют и другие типы холинэстераз (ХЭ), например бутирилхолинэстераза (БуХЭ, 3.1.1.8), физиологическая роль которой остается неизвестной. В начале XX века было обнаружено, что ХЭ являются мишенью для фосфорорганических соединений нервнопаралитического действия (зарин, табун и т.д.). ХЭ используется в качестве модели для исследования механизмов работы ферментов. Известно, что продуктивной для гидролиза под действием АХЭ является полностью вытянутая по холиновому фрагменту конформация АХ.

Целью данной работы было выявление особенностей продуктивной сорбции аналогов АХ с общей формулой $\text{R}_1\text{COO}(\text{CH}_2)_2\text{N}^+\text{R}_2\text{R}_3\text{R}_4$ при взаимодействии с АХЭ и БуХЭ. Методом молекулярной механики с помощью пакета ZMM были проведены расчеты всех устойчивых конформеров 30 аналогов АХ с различными группами $\text{R}_1 - \text{R}_4$. Расчеты проводились в потенциальных полях Дашевского. Распределение электронной плотности рассчитывалось с помощью программы CNDO. Расчет объемов молекул проводился программой Volume. В ряду $\text{R}_1\text{COO}(\text{CH}_2)_2\text{N}^+(\text{CH}_3)_3$ выявлена корреляция между объемом молекулы и способностью к гидролизу под действием АХЭ, подобной зависимости при взаимодействии с БуХЭ не обнаружено. Также наблюдается корреляция между заселенностью полностью вытянутых по холиновому фрагменту конформеров и скоростью их гидролиза под действием АХЭ. Обнаружены стерические ограничения для сорбции катионной группировки в активном центре БуХЭ. Полученные данные согласуются с известными результатами рентгеноструктурного анализа АХЭ и процедурами стыковки вручную (manual docking).

Применение экспериментальных и компьютерных методов для идентификации множественных тканеспецифических продуктов гена церулоплазмينا

А. В. Васин, С. А. Клотченко, Н. А. Платонова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Церулоплазмин (ЦП, КФ 1.16.3.1.) относится к категории «moonlighting» белков (Calabrese et al., 2002), выполняющих в разных органах различные функции, меняющиеся в течение онтогенеза. Так, ЦП является транспортером меди (Cu), как ферроксидаза обеспечивает двунаправленный транспорт железа (Fe) через клеточные мембраны, участвует в антиоксидантной защите, контролирует формирование межклеточных связей в мозгу. Гаплоглидный набор млекопитающих содержит одну копию гена ЦП. В то же время, его белковые продукты представлены различными тканеспецифическими молекулярными формами, механизм образования и экспрессии которых малоизучен. Поэтому мутации в гене ЦП вызывают широкий спектр тяжелых наследственных заболеваний. В настоящей работе из клеток печени, селезенки, сердца, семенников, молочной железы 20-го дня беременности, почек, а также отделов мозга (мозжечка, коры, гиппокамп, сосудистого сплетения и гипофиза) крысы сочетанием методов дифференциального и изоплотностного центрифугирования выделены плазматическая мембрана (ПМ), мембраны секреторного пути клетки (МСПК), митохондрии (МТ), лизосомы (ЛС) и пероксисом (ПС). Субклеточные фракции были идентифицированы по величине плавучей плотности и присутствию маркерных ферментов. Методом высокочувствительного хемилюминесцентного иммуноблотинга с помощью специфических поликлональных антител к ЦП крысы показано, что иммунореактивные полипептиды ЦП присутствуют во фракции МСПК всех органов. На ПМ ЦП обнаружен во всех изученных тканях, но не в печени, сосудистом сплетении, сердце и селезенке. В ЛС клеток мозга и семенников найдены низкомолекулярные фрагменты ЦП. В ПС ни одного из органов ЦП не найден. Полноразмерные полипептиды ЦП найдены в МТ мозга, печень, почки, семенниках, развивающейся молочной железе, которые связаны с матриксом и внутренней мембраной. С помощью селективных праймеров для кДНК, кодирующей секреторный или гликозилфосфатидилинозитол(ГФИ)-связанный ЦП, методом ОТ-ПЦР показано, что мРНК, программирующая синтез секреторной формы ЦП присутствует везде, кроме сердца и селезенки, а мРНК ГФИ-ЦП — в семенниках, коре, гиппокампе, гипофизе, мозжечке и молочной железе. Эти данные хорошо объясняют присутствие ЦП на ПМ и в составе МСПК. Для

идентификации ЦП-мРНК, программирующую синтез ЦП, присутствующего в митохондриях, были применены компьютерные методы. Известно, что в геноме человека, помимо гена ЦП, локализованного на хромосоме 3, есть псевдоген ЦП, являющейся продуктом обратной транскрипции и находящийся на хромосоме 8. Способность псевдогена ЦП экспрессироваться была проверена с помощью компьютерных программ Clustal, PAML 3.0. В одной рамке считывания найдена непрерывно транслирующаяся нуклеотидная последовательность, кодирующая пептид из 328 аминокислот, содержащий на N-конце потенциальный сигнал доставки в митохондрии. В 5-районе от этой последовательности идентифицируется потенциальный эукариотический промотор. Анализ соотношения значимых и незначимых замен между последовательностями церулоплазмينا и его псевдогена не выявил в псевдогене областей, подвергающихся давлению отбора. Планируется проверить присутствие транскриптов псевдогена ЦП методом ОТ-ПЦР.

Обнаружение мутации и полиморфизма в гене миоцилина у больных глаукомой в Санкт-Петербурге

В. В. Егоров , В. В. Рахманов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Глаукома — группа заболеваний глаз, характеризующаяся повышением внутриглазного давления, развитием прогрессирующей оптической нейропатии с последующей атрофией головки зрительного нерва и возникновением типичных дефектов поля зрения. В мире насчитывается около 70 млн. человек, страдающих глаукомой. Первичная открытоугольная глаукома (ПОУГ) является наиболее частой формой глаукомы и одной из главных причин ослабления зрения и слепоты, патогенез которой определяется несколькими генами. Для одного из них (GLC1A) известна нуклеотидная последовательность. Мутации в этом гене являются причиной 2–4% случаев ПОУГ. Ген GLC1A локализован на длинном плече первой хромосомы (1q24.3-q25.2.) и содержит 3 экзона размером 604, 126 и 782bp. Белковый продукт гена известен как миоцилин (TIGR/MYOC), состоящий из 504 аминокислот (~ 58 кДа). Мутации в гене GLC1A приводят к образованию миоцилина, не специфически взаимодействующего с компонентами трабекулярной сети, в результате чего возникает нарушение оттока внутриглазной жидкости и, как следствие, ПОУГ. К настоящему моменту в мире описано несколько десятков мутаций в гене GLC1A, являющихся причиной данной патологии. Для исследования мы выбрали фрагмент

экзона 3 гена *GLC1A* длиной 190 пар нуклеотидов, в пределах которого локализованы наиболее часто встречающиеся мутации, вызывающие ПОУГ. Цель исследования состоит в определении спектра мутаций в гене *GLC1A*, характерных для больных ПОУГ в популяции Санкт-Петербурга и в разработке методов быстрого их тестирования. Для этого была создана коллекция геномных ДНК 60 больных с семейной (38) и спорадической (22) формами ПОУГ. ДНК выделяли из свежей крови по методу Кюнкеля. Участок экзона 3 гена *GLC1A* длиной 190 пар нуклеотидов был амплифицирован методом ПЦР. Далее ПЦР-продукты исследовали с помощью гетеродуплексного анализа и анализа конформационного полиморфизма однонитевых фрагментов ДНК (SSCP-анализа). С помощью SSCP-анализа мы обнаружили образцы с аномальной электрофоретической подвижностью однонитевых конформеров ДНК. Три образца, показавшие различную электрофоретическую подвижность, были секвенированы. Секвенирование показало наличие однонуклеотидных замен в двух образцах, последовательность же третьего соответствовала норме. Обнаруженная в первом образце однонуклеотидная замена приводит к замене триплета, соответствующего глутамину, на стоп-кодон (Gln368STOP) и является наиболее распространенной в мире мутацией, приводящей к глаукоме, однонуклеотидная замена во втором образце не приводит к изменению аминокислотной последовательности (Tyr347Tyr) белка и является ранее описанным в мире полиморфизмом. Паттерн, соответствующий замене Gln368STOP был обнаружен только для одного образца ДНК пациента (с семейной историей ПОУГ). Разработана методика быстрого поиска данной мутации на основе метода полиморфизма длин рестрикционных фрагментов. Планируется провести скрининг ДНК родственников этого больного и консультирование офтальмологом носителей обнаруженной мутации. Также планируется пополнение банка ДНК больных с семейной и спорадической формами ПОУГ и продолжение поиска новых и известных в мире мутаций, а также степени полиморфизма у больных глаукомой в популяции Санкт-Петербурга.

Механизм спиновой релаксации Дьяконова–Переля.

Эффекты электрон-электронных столкновений

М. М. Глазов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Расщепление спиновых веток кривой дисперсии электронов проводимости в полупроводниковых системах без центра инверсии приводит к возникновению эффективного механизма спиновой релаксации свободных электро-

нов. Влияние этого расщепления эквивалентно эффективному магнитному полю, в котором частота ларморовой прецессии спина зависит от величины и направления волнового вектора электрона. Рассеяние электронов приводит к хаотическому изменению этого эффективного поля и замедляет спиновую релаксацию [1, 2].

В настоящей работе теоретически исследуется спиновая релаксация газа электронов в квантовой яме при произвольной степени вырождения. Нами было показано, что электрон-электронные столкновения замедляют и контролируют спиновую релаксацию по механизму Дьяконова–Переля также, как и процессы рассеяния электронов по импульсу и было вычислено время спиновой релаксации для двумерного невырожденного электронного газа в случае, когда межэлектронные столкновения доминируют над процессами релаксации импульса [3].

Для вычисления времени релаксации электронного газа по спину решалось кинетическое уравнение для спиновой матрицы плотности, выведенное с учетом как прямого, так и обменного электрон-электронного взаимодействия.

Для невырожденных электронов в квантовой яме с барьером конечной высоты время спиновой релаксации зависит от ширины ямы немонотонно, максимум этого времени определяется наибольшей локализацией электрона в яме [4].

Вычисленная температурная зависимость времени спиновой релаксации для газа двумерных электронов с произвольной степенью вырождения в области высоких температур переходит в результат [3], при низких температурах вклад межэлектронных столкновений в спиновую релаксацию ослабевает.

Список литературы

- [1] М.И. Дьяконов, В.И. Перель, *ФТТ* **13**, 3581 (1971).
- [2] М.И. Дьяконов, В.Ю. Качоровский, *ФТП* **20**, 178 (1986).
- [3] М.М. Глазов, Е.Л. Ивченко, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 476 (2002).
- [4] М.М. Глазов, *ФТТ* **45**, 1108 (2003).

Когерентное обратное рассеяние света с конечной шириной спектра

Н. В. Ларионов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

При теоретическом описании когерентного обратного рассеяния (КОР) света атомами в магнитооптических ловушках, как правило, ограничива-

ются случаем монохроматического пробного излучения [1, 2]. Это обусловлено малой шириной спектра такого излучения (в [2] использовался лазер с внешним резонатором шириной спектра 1 МГц) по сравнению с естественной шириной атомной линии поглощения γ . Пренебрежение шириной спектра хорошо обосновано при расчете конуса обратного рассеяния, т.е. особенностей угловой зависимости сечения рассеяния для направлений, близких к направлению рассеяния назад. При анализе спектральной зависимости сечения рассеяния такое пренебрежение не анализировалось. В настоящей работе рассчитана зависимость фактора усиления при КОР (т.е. отношение полной интенсивности света, рассеянного строго назад к интенсивности света, рассеиваемого вне конуса) от частоты рассеиваемого света. Проанализировано влияние формы спектра падающего света, а также его ширины. Рассмотрены два типа спектральных линий падающего света - лоренцева и гауссова. Ширины выбирались от одной десятой до половины естественной ширины линии атома. Рассмотрен как случай неподвижных атомов, так и движущихся. Движение атомов меняет форму контура поглощения, что существенно влияет на форму спектра КОР. В работе рассматривались случаи рассеивающих атомных облаков, имеющих достаточно малую температуру, так, что характерные доплеровские сдвиги частоты не превышали. Расчеты проводились для атомов рубидия $85(\gamma \gg 6 \text{ МГц})$. Выполненные расчеты показали, что учет конечной ширины падающего света приводит к изменению формы спектра фактора усиления, особенно существенному для отстроек, превышающих γ . При анализе спектрального состава рассеянного света обнаружено его существенное отличие от спектра, падающего света. Все полученные в работе результаты удалось объяснить как следствие усиления относительной роли многократно рассеянного света.

Список литературы

- [1] D. V. Kupriyanov, I. M. Sokolov, P. Kulatunga, C. I. Sukenik, M. D. Havey and P. Kulatunga, *Phys. Rev. A* **67**, 013814 (2003).
- [2] G. Labeyrie, D. Delande, C. A. Muller, C. Miniatura and R. Kaiser, *Europhys. Lett.* **61** (3), 327–333 (2003)

Генерация и усиление антистоксового излучения при вынужденном комбинационном рассеянии в условиях фазового квазисинхронизма

Н. С. Макаров

Санкт-Петербургский Государственный институт точной механики и оптики
(Технический университет)

Методами численного моделирования были изучены решения систем дифференциальных уравнений, описывающих стационарное и нестационарное многоволновое ВКР и многоволновое ВКР с учетом дифракции, была изучена возможность реализации условий фазового квазисинхронизма в условиях многоволнового ВКР [1]. Было показано, что учет генерации высших стоксовых и антистоксовых компонент ВКР приводит к уменьшению общей длины ВКР-активной среды и практически не влияет на эффективность антистоксового ВКР-преобразования, а также было выявлено, что эффективность генерации высших стоксовых и антистоксовых компонент ВКР сильно зависит от дисперсии рамановской нелинейности. Расчеты показали, что применение периодической слоистой структуры для реализации условий фазового квазисинхронизма практически не снижает эффективность антистоксовой ВКР-генерации. Было установлено, что влияние погрешности длины активного слоя в периодической слоистой структуре на эффективность антистоксового ВКР-преобразования значительно ниже, чем влияние погрешности длины пассивного слоя. Проведенное исследование показало, что максимальная эффективность антистоксового ВКР-преобразования практически не зависит от длительности импульса, однако длина среды, на которой эта эффективность достигается, и количество необходимых для этого слоев существенно зависят от длительности импульса. В ходе численного моделирования было установлено, что снижение длины ВКР-активной среды за счет увеличения интенсивностей взаимодействующих волн приводит к существенному снижению эффективности антистоксового ВКР-преобразования из-за увеличения эффективности генерации второй стоксовой компоненты ВКР. Было установлено, что в фиксированной периодической слоистой структуре, оптимальной для реализации фазового квазисинхронизма при стационарном ВКР, как в водороде, так и в нитрате бария, возможно эффективное преобразование импульсов с длительностью от 3 нс и более. Было определено, что при числе Френеля равном трем эффективность антистоксового ВКР-преобразования достигает своего максимального значения и с дальнейшим ростом числа Френеля практически не изменяется. Исследование показало, что эффек-

тивность антистоксового ВКР-преобразования максимальна в том случае, когда перетяжка гауссова пучка находится внутри ВКР-активной среды. Полученные результаты численного моделирования указывают возможные пути повышения эффективности антистоксового ВКР преобразования и открывают перспективы создания новых эффективных нелинейно-оптических устройств, повышающих частоту лазерного излучения.

Список литературы

- [1] Беспалов В.Г., Макаров Н.С., Оптика и спектроскопия, (2003) (принято к публикации).

Статистическое исследование гамма-всплесков

А. В. Моисеев

Санкт-Петербургский государственный университет

Сейчас существует множество различных моделей источников гамма-всплесков, связывающих всплески с различными «обычными» объектами. Распределения возможных «прародителей» гамма-всплесков характеризуются фрактальными размерностями. Сравнивая фрактальные размерности распределений «прародителей» с полученными данными для распределения соответствующего класса гамма-всплесков можно судить о том, насколько подходит данный тип объектов в качестве «прародителя». Таким образом величина фрактальной размерности распределения для всплесков какого-либо класса может служить критерием для отбора кандидатов в «прародители» или, наоборот, давать информацию о распределении «прародителей».

Для исследования классификаций данные о гамма-всплесках брались из окончательного каталога BATSE (Burst And Transient Source Experiment) на конец 2000 года. Было рассмотрено три типа классификаций: классификации по продолжительностям T_{90} , где T_{90} — время, за которое накапливается 90% энергии всплеска; двумерные классификации по продолжительностям T_{90} и жесткостям спектров HR и эмпирические классификации. Для многих классификаций, введившихся разными авторами, были рассчитаны фрактальные размерности выделенных классов всплесков.

Также была рассмотрена обратная задача — поиск класса всплесков на диаграмме $(T_{90}; HR)$, который имел бы фрактальное распределение, т.е. фрактальную размерность $D \neq 2$. Классы выделялись посредством критериев вида $F(HR) < G(T_{90})$, где F и G — достаточно простые функции.

Показано, что распределения выделявшихся ранее классов гамма-всплесков по небесной сфере является однородным. Класса гамма-всплесков, имеющего фрактальную размерность $D \neq 2$, не существует.

Динамика платинирования гистоновых белков

М. В. Новождёнова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Цис-дихлородиамминоплатина (II) (цисплатин) — широко применяемый в химиотерапии рака нейтральный комплекс платины. На данный момент считается общепринятым, что главной мишенью действия цисплатина является молекула ДНК. Однако в последнее время появились данные о том, что надо учитывать взаимодействие платиновых комплексов с белками для того, чтобы объяснить механизм действия цисплатина и направленно разрабатывать новые противоопухолевые препараты. Целью нашей работы является выяснение роли взаимодействия цисплатина с гистонами, которые находятся в высокой концентрации около ДНК и практически всё время с ней ассоциированы, а поэтому могут претендовать на роль промежуточного резервуара и/или инактиваторов терапевтических комплексов платины. Ранее нами было показано, что коровые гистоны эффективно взаимодействуют с цисплатином. Предметом настоящей работы явилось изучение характерных скоростей реакций при данном взаимодействии. Гистоны получали стандартными методами, их концентрацию определяли спектрофотометрически. За кинетикой реакций наблюдали с помощью метода спектроскопии КД. Наличие платинирования гистонов дополнительно проверялось с помощью обращения реакций под действием ионов CN^- . Компьютерный анализ спектров КД показал, что при взаимодействии с цисплатином для гистонов H2a и H2b наблюдается стабилизация α -спиральной упаковки, для H3 и H4-дестабилизация. Измерены константы скорости псевдопервого порядка реакции взаимодействия цисплатина с гистонами. На основе полученных значений мы предполагаем, что реакция цисплатина с H2a и H2b идет преимущественно через стадию предварительного гидролиза цисплатина; взаимодействие с H3 — путём прямой реакции цисплатина с белком; реакция с H4 может протекать по двум путям. Электрофоретический анализ проб гистон-цисплатин при разном времени инкубации показал, что подвижность белков при платинировании меняется. Наблюдаемые изменения малы. Это указывает на малую вероятность образования сшитых гомодимеров гистонов. Повреждения, наиболее вероятно, представляют собой монофункциональные комплексы или (S, N(амид))-хелаты.

Полученные данные указывают на то, что при дальнейшем изучении комплексов ДНК-белок-цисплатин необходимо учитывать вклад структурных изменений, вызванных платинированием гистонов.

Нелинейные восприимчивости слабонеупорядоченного изинговского ферромагнетика в критической области

Д. В. Пахнин, А. И. Соколов, Б. Н. Шалаев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

С середины 70-х годов критическая термодинамика примесных систем интенсивно изучается теоретически и экспериментально. Одним из крупнейших достижений теории явилось вычисление с помощью метода ренормализационной группы (РГ) критических индексов и отношений критических амплитуд трехмерной слабонеупорядоченной модели Изинга [1, 2]. Цель данной работы состоит в расчете нелинейных восприимчивостей четвертого и шестого порядков для примесных изинговских ферромагнетиков в критической области. Теория строится в рамках метода реплик, что соответствует использованию гамильтониана n -векторной кубической модели в пределе $n \rightarrow 0$, а в качестве исходных данных используются координаты примесной фиксированной точки уравнений РГ, найденные ранее в пяти- и шестипетлевом приближениях [1–3]. Искомые нелинейные восприимчивости могут быть представлены в виде [4]

$$\begin{aligned}\chi_4 &= -24\chi^2 m^{-3} v_4, \\ \chi_6 &= 720\chi^3 m^{-6} (8v_4^2 - v_6).\end{aligned}\quad (1)$$

где χ — линейная восприимчивость, а v_4 и v_6 — эффективные безразмерные константы связи четвертого и шестого порядков, входящие в уравнение состояния примесной модели Изинга. Вершина v_6 была вычислена нами ранее для кубической модели при произвольном n в четырехпетлевом приближении [5], и полученное РГ разложение может быть использовано для расчета χ_6 . Поскольку РГ ряды являются асимптотическими, для извлечения из них численных значений физических величин необходимо применять ту или иную процедуру пересуммирования. В данной работе мы используем метод Паде–Бореля–Леруа.

Опуская детали вычислений (см. [4]), приведем окончательные результаты. Для безразмерной вершины шестого порядка нами получено значение $v_6 = 2.1 \pm 0.2$. Поскольку в выражение для χ_6 и в уравнение состояния входит отношение v_6/v_4^2 , при сопоставлении критических асимпто-

тик чистой и примесной систем естественно сравнивать численные значения именно этого отношения. Для примесной системы наш расчет дает $v_6/v_4^2 = 0.87$, тогда как для чистой $v_6/v_4^2 = 1.65$. Столь же сильно отличаются оценки для нелинейных восприимчивостей в критической области. Так, значение χ_4 для примесного ферромагнетика на 50–60% больше чем для чистого, а χ_6 неупорядоченного и чистого кристаллов отличаются почти в 3 раза. Это значит, что измерение нелинейных восприимчивостей может служить эффективным способом идентификации примесного критического поведения в натуральных и компьютерных экспериментах.

Список литературы

- [1] D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, *Phys. Rev. B* **61**, 15130 (2000).
- [2] D. V. Pakhnin, A. I. Sokolov, *Письма в ЖЭТФ* **71**, 600 (2000).
- [3] A. Pelissetto and E. Vicari, *Phys. Rev. B* **62**, 6393 (2000).
- [4] Д. В. Пахнин, А. И. Соколов, Б. Н. Шалаев, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 459 (2002).
- [5] D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, *Phys. Rev. B* **64**, 094407 (2001).

Модификация метода приближенного расчета площади поверхности макромолекулы, доступной растворителю

Г. Н. Рычков, М. Г. Петухов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Данная работа является частью проекта создания вычислительно-эффективного метода расчета сводной энергии белков. Существуют эмпирические зависимости, которые позволяют достаточно точно и эффективно аппроксимировать все основные взаимодействия белка с водой на основе расчета поверхности контакта между белком и молекулами воды [1]. Однако, имеющиеся точные методы расчета таких поверхностей, к сожалению, не позволяют получать аналитические производные свободной энергии гидратации от конформации белка, что необходимо для моделирования молекулярной динамики, а также поиска низкоэнергетических конформаций с помощью методов глобальной минимизации. В данной работе мы разработали новый метод приближенного расчета поверхности белка, одновременно позволяющий легко получать аналитические производные энергии гидратации. Был реализован и модифицирован метод приближённого расчёта площади поверхности макромолекулы, доступной растворителю (ППДР), предложенный в [2]. В частности к классам атомов, описанных в [2], добавлены атомы водорода, играющие важную роль в процессе гидратации. Чисто эмпирические третьи и четвертое слагаемые расчетной

формулы заменены геометрически осмысленными и легко дифференцируемыми поправочными слагаемыми. Была проведена полная оптимизация набора параметров метода, с использованием высокоэффективного, туннельного алгоритма [3]. Благодаря этому удалось улучшить (примерно в два раза) значения средних атомарных отклонений от точной ППДР (менее 1,5A²) для белков в свёрнутой конформации. Кроме этого удалось также значительно уменьшить количество атомов, приближенное значение ППДР которых имеет отклонения от точной величины большие, чем 6A² (контактная поверхность одной молекулы воды). Значения максимальных отклонений примерно в 1,5 раза меньше указанных в оригинальной работе. Для белков в развёрнутой конформации метод даёт высокие максимальные отклонения ППДР, но средние отклонения не превышают 2,5A².

Список литературы

- [1] Петухов М., Рычков Г., Серрано Л., *Бреслеровские чтения* (2002): Молекулярная генетика, биофизика и медицина сегодня (Ланцов В. ed.), Vol. 1, pp. 148–168. Из-во ПИЯФ РАН, Санкт-Петербург, РФ.
- [2] Weiser J., Shenkin P. S., Still W. C., *J. Comp. Chem.* **20**, 217–230 (1999).
- [3] Petukhov M. G., Dorofeev V. E., Abagian R. A., Mazur A. K., *Biophysics* **37**(2), 154–157 (1992).

Анализ MAP-киназных каскадов трансформированных фибробластов грызунов после действия облучения и в условиях сывороточного голодания

И. А. Савельева, Т. В. Поспелова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Изучение молекулярных механизмов канцерогенеза имеет не только теоретическое, но и практическое значение, поскольку число больных раковыми заболеваниями стремительно растет, однако успешная лекарственная терапия, основанная на точном понимании молекулярных механизмов канцерогенеза, отсутствует. Важность изучения Митоген Активируемых Протеинкиназных (MAP-киназных) каскадов, исследуемых в данной работе, состоит в том, что от их функционирования зависит, правильность проведения пролиферативных сигналов и деления клетки. Поскольку интегральные компоненты MAP-киназных каскадов кодируются протоонкогенами, определенные нарушения работы этих генов могут активировать каскады в отсутствие пролиферативных стимулов, превращая нормальные клетки в автономно-пролиферирующие опухолевые клетки.

Целью данной работы является исследование MAP-киназных каскадов и регуляции событий клеточного цикла у трансформантов E1A+E1B-19кДа и E1A+c-Na-ras, различающихся по свойствам автономной пролиферации после ДНК-повреждающего действия рентгеновских лучей и стрессорных условий сывороточного голодания. Трансформанты E1A+E1B-19кДа и E1A+c-Na-Ras были получены путем переноса онкогена E1A аденовируса 5 типа человека, в комплементации с аденовирусным онкогеном E1B19кДа или клеточным онкогеном cNa-ras в эмбриональные фибробласты крыс. Трансформанты E1A+c-Na-ras неспособны блокировать пролиферацию в определенных точках клеточного цикла, после действия ДНК-повреждающих агентов и в условиях сывороточного голодания, тогда как трансформанты E1A+E1B19кДа делают это как и спонтанно иммортализованные эмбриональные фибробласты крысы (REF52).

Методом иммуноблоттинга был проведен анализ содержания и способности к регуляции трех основных MAP-киназных каскадов: ERK1,2, JNK1,2 и p38 после действия облучения и голодания на бессывороточной среде. В эксперименте использовали антитела, опознающие фосфорилированные и нефосфорилированные формы киназ ERK1,2, JNK1,2 и p38. Обнаружено, что содержание неактивных форм киназ повышается при трансформации и не зависит от типа комплементирующего онкогена. Содержание фосфорилированных форм киназ, представляющих собой активные формы, изменяется при трансформации преимущественно для ERK1,2 и зависит от типа комплементирующего онкогена. Действие рентгеновских лучей и сывороточного голодания приводит к изменению степени фосфорилирования преимущественно киназ ERK1,2 в клетках, способных осуществлять остановку после данных воздействий (REF52 и E1A+E1B-19кДа). При этом в первые минуты голодания в этих клетках наблюдается полное отсутствие активных фосфорилированных форм ERK1,2, с последующим восстановлением пула фосфо-форм ERK1,2 через несколько часов. Методом проточной цитометрии показано, что способность к регуляции киназ Erk1,2 коррелирует со способностью этих клеток останавливаться в фазе G1/S после удаления ростовых факторов сыворотки. Трансформанты E1A+c-Na-ras, не способные останавливаться на границе G1/S-фаз клеточного цикла имеют одинаково высокий уровень фосфорилирования Erk1,2 на протяжении всего исследованного периода сывороточного голодания, а также после действия ионизирующего излучения. Методом иммуноцитохимии показано, что сывороточное голодание приводит к частичному перемещению фосфорилированных форм ERK из ядра в цитоплазму эмбриональных фибробластов, тогда как в трансформантах E1A+c-Na-ras фос-

форилированные формы ERK1,2 локализованы преимущественно в ядре. Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что наиболее чувствительным к удалению сыворотки и действию рентгеновских лучей во всех трех исследуемых клеточных линиях является ERK-киназный каскад. Ядерная локализация фосфо-форм ERK-киназ у трансформантов E1A+c-Na-gas в условиях сывороточного голодания, может быть одной из причин нерегулируемой пролиферации этих трансформантов, связанной с постоянной активацией циклин-киназных комплексов. Проведенная работа позволяет предположить о существовании перекреста компонентов исследуемых MAP-киназных каскадов с основными мишенями клеточного цикла, которые отвечают за реализацию блоков клеточного цикла у нормальных клеток после действия стрессорных агентов. Целью дальнейших исследований является изучение молекулярных механизмов нарушения этого перекреста.

Список литературы

- [1] Копнин Б.П. 2000. Мишени действия онкогенов и опухолевых супрессоров: ключ к пониманию базовых механизмов канцерогенеза. Биохимия. 65(1): 5–33.
- [2] Black E.J., Clark.W., Gillespie D.A.F. 2000. Transient deactivation of ERK signaling is sufficient for stable entry into G0 in primary avian fibroblasts. Curr. Biol. 10: 1119–1122.
- [3] Bayley S.T. and Mymryk J.S. 1994. Adenovirus E1A proteins and transformation. Int. J. of Oncology. 5: 425–444.
- [4] Hunter T. 1997. Oncoprotein network. Cell. 88: 333–346.
- [5] Wilkinson M.G. and Millar J.B.A. 2000. Control of the eukaryotic cell cycle by MAP kinase signaling pathways. The FASEB J. 14: 2147–2157.

Теоретическое исследование жидкокристаллического упорядочения в полимерных щетках

М. Н. Чернявский

Санкт-Петербургский государственный университет

Проведено теоретическое исследование лиотропного ЖК-перехода в полимерной щетке — слое привитых полимерных цепей, состоящей из свободно-сочлененных жестких сегментов. В качестве факторов, вызывающих ЖК-переход, рассматривались ухудшение качества растворителя, в которой помещалась щетка, и деформация щетки внешней силой. Для описания исследуемой системы использовалось среднеполюсовое приближение и применялась модель ящика Александра–де Жена. Показано, что при ухудшении качества растворителя в полимерной щетке происходит лиотропный

ЖК переход. В зависимости от длины сегмента и плотности прививки переход может идти как фазовый переход первого рода или непрерывно. Наряду с состоянием набухшей щетки и ЖК упорядоченной щетки наблюдается метастабильное планарное состояние. Были построены фазовые диаграммы системы. Установлено, что параметром, существенно определяющим положение точки перехода, является жесткость. При не слишком большой длине жесткого сегмента в зависимости от плотности прививки фазовая диаграмма имеет регулярный или сингулярный вид. Лиотропный ЖК-переход наблюдается и при деформации щетки. В отличие от предыдущего случая он происходит даже в хорошем растворителе. На фазовой диаграмме в зависимости от плотности прививки и длины жесткого сегмента наблюдается либо аналогия с полимерным раствором, либо появление критической точки.

Расчет пространственной корреляционной функции кулоновского кристалла

А. И. Чугунов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Доклад посвящён изучению корреляционных свойств сильно неидеальной плазмы ионов на фоне нейтрализующего электронного заряда. Такая плазма содержится в ядрах белых карликов, оболочках нейтронных звезд [1], а также исследуется в лаборатории (пылевая плазма и плазма ионов в пеннинговских ловушках). Физические условия в этой плазме удобно описывать двумя безразмерными параметрами:

$$\Gamma = Z^2 e^2 / aT$$

и

$$\theta = \hbar \omega_p / T,$$

где ω_p — ионная плазменная частота, a — ионный радиус, $Z|e|$ и n — заряд и концентрация ионов. В квантовом случае более удобен другой параметр — $\Gamma_q = Z^2 e^2 / a \hbar \omega_p$, зависящий только от плотности. В классическом пределе ($\theta \ll 1$), состояние ионов определяется тепловыми колебаниями, поэтому зависимость от параметра θ пропадает. В квантовом случае ($\theta \gg 1$) тепловыми колебаниями можно пренебречь, и состояние ионов определяется одним параметром Γ_q . При достаточно большом значении параметров Γ и Γ_q ионы образуют кулоновский кристалл. Например, в коре нейтронной звезды преобладает кристаллическое вещество.

В докладе рассмотрен приближённый метод вычисления пространственной корреляционной функции ионов, основанный на гармоническом

приближении [2, 3]. Этот метод требует значительно меньших вычислительных ресурсов, чем численные методы типа Монте-Карло, и применим, в частности, при достаточно сильных нулевых колебаниях, где классический метод Монте-Карло использовать нельзя.

Показано наличие эффекта «замораживания» парной корреляционной функции при температурах $T < 0.1T_p$ (где $T_p = \hbar\omega_p$). В этом случае корреляционная функция перестаёт зависеть от температуры, т.к. ионные корреляции определяются нулевыми колебаниями. С ростом температуры происходит уменьшение высоты корреляционных пиков и увеличение их ширины, обусловленное увеличением среднеквадратичного отклонения ионов от узлов решётки. При фиксированном θ увеличение параметра Γ_q (т.е. уменьшение плотности) приводит к уменьшению относительного среднеквадратичного отклонения ионов от узлов решётки и, следовательно, росту высоты и уменьшению ширины корреляционных пиков.

Список литературы

- [1] С. Шапиро, С. Тюполюский. Черные дыры, белые карлики, нейтронные звезды, Москва, Мир, 1985.
- [2] Д.А. Байко. Кинетические явления в остывающих нейтронных звёздах. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Санкт-Петербург, 2000.
- [3] D.A. Baiko, D.G. Yakovlev, H.E. De Witt, W.L. Slattery, *Phys. Rev. E* **61**, 1912 (2000).

Кандидатские проекты

Получение и исследование лазерной генерации в полупроводниковых структурах с фотонными кристаллами

Е. М. Аракчеева

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Разработана технология получения полупроводниковых одномерных фотонных структур. Полосковый InGaAs/GaAs микролазер, шириной 18 мкм и длиной 200 мкм, представлял собой 3 периода глубоко протравленных распределенных Брэгговских отражателей воздух/полупроводник с одной стороны и сколотую грань с другой. Технология изготовления микролазера включала как оптическую, так и электронную литографию, а также метод реактивного ионного травления. Хотя получение РБО с одним периодом очень перспективно, наши отражатели имели 3 периода, а именно ширина полупроводника была $3l/(4n_{\text{sem}}) = 210$ нм и толщина воздушного зазора $3l/(4n_{\text{air}}) = 730$ нм, где $l = 970$ нм — длина волны излучения, а $n_{\text{air}}(n_{\text{sem}})$ — показатели преломления воздуха (полупроводника). Лазерная структура была выращена методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Распределенные Брэгговские отражатели формировались с помощью реактивного ионного травления. Характеристики микролазера были измерены в 100 нс импульсном режиме с частотой следования 10 кГц при комнатной температуре. Пороговый ток лазера с глубоко протравленными распределенными Брэгговскими отражателями получился 30 мА, а, соответственно, плотность порогового тока 830 А/см². Также для сравнения были созданы стандартные широкополосные устройства. Для резонаторов, длиной 200 мкм и шириной 100 мкм, со сколотыми гранями плотность порогового тока получилась 500 А/см². Максимальная выходная мощность микролазера, измеренная со стороны сколотой грани составляла 80 мВт. Отметим, что не наблюдалось никакой деградации эффективности. Выходная мощность со стороны распределенных Брэгговских отражателей меньше, благодаря более высокому коэффициенту отражения РБО по сравнению с коэффициентом отражения сколотой грани ($R_{\text{ск}} = 0.3$). Сравнивая выходные мощности со стороны РБО и сколотой грани, был рассчитан коэффициент отражения РБО $R_{\text{РБО}} = 0.73$, который хорошо сопоставляется с лучшими экспериментальными результатами для глубокопротравленных распределенных Брэгговских отражателей. Спектральное разделение между продольными модами D1 получилось 0.7 нм и может быть увеличено

путем уменьшения длины прибора. Полуширина линии излучения составила всего 2 нм.

Вклад диаграмм двухфотонного обмена в энергию $(1s)^2 2p_{3/2}$ состояния литиеподобных многозарядных ионов

*А. Н. Артемьев*¹, В. А. Ерохин¹, М. М. Сысак¹, В. М. Шабаев¹, Т. Байер², Г. Зофф³, Г. Плуниен³

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Germany

³ Institut für Theoretische Physik, TU Dresden, Dresden, Germany

В настоящей работе представлены вычисления вклада диаграмм Двух фотонного обмена в энергию $(1s)^2 2p_{3/2}$ состояния литиеподобных многозарядных ионов. Вычисления произведены в рамках квантовой электродинамики во всех порядках по αZ , где α — постоянная тонкой структуры, Z — заряд ядра.

С учетом наших предыдущих расчетов вклада диаграмм двух фотонного обмена в энергию $(1s)^2 2s$ состояния многозарядных литиеподобных ионов [1], данный расчет позволяет вычислить вклад диаграмм двухфотонного обмена в энергию $2p_{3/2} - 2s$ перехода в литиеподобных ионах, что существенно уменьшает погрешность теоретического значения данной величины.

Ранее вклад диаграмм двухфотонного обмена оценивался с помощью многочастичной теории возмущений. В нашей работе мы приводим сравнение такого подхода с точным, квантовоэлектродинамическим.

Список литературы

- [1] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, M. M. Sysak, O. M. Zharebtsov, and G. Soff, *Phys. Rev. A* **64**, 032109 (2001).

Диэлектронная рекомбинация с использованием отрицательного континуума в тяжелых ионах

*А. Н. Артемьев*¹, В. А. Ерохин¹, А. Е. Класников¹, В. М. Шабаев¹, Т. Байер², К. Кожухаров², Т. Штолкер²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Germany

В настоящей работе исследован новый механизм образования электрон-позитронных пар. Рассмотрены столкновения тяжелых ядер с электронами.

Хорошо известно, что при таких столкновениях доминирующим каналом реакции в широком диапазоне энергий столкновения будет радиационная рекомбинация, при которой налетающий электрон захватывается ядром в связанное состояние с одновременным испусканием фотона. Однако, с ростом энергии столкновения, испущенный фотон приобретает энергию, достаточную для рождения электрон-позитронной пары, при котором вновь рожденный электрон также захватывается в связанное состояние.

Таким образом, мы рассматриваем процесс, в начальном состоянии которого имеются тяжелое ядро и электрон, а в конечном - двухэлектронный ион и позитрон. На сегодняшний день нами рассмотрен только процесс, при котором двухэлектронный ион находится в основном состоянии.

Нами были рассчитаны дифференциальное и полное сечение этого процесса в широком диапазоне энергий столкновения. Результаты приведены как для системы отсчета, в которой покоится ядро, так и для системы отсчета, в которой покоится электрон.

Процессы удаления нескольких электронов при взаимодействии ионов H^+ и He^{2+} из внешней оболочки атомов Ag и Xe

К. В. Кашиников

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

В работе исследовались процессы удаления нескольких электронов из атомов мишени при столкновениях протонов и альфа-частиц при параметрах удара больших или равных радиусам внешних оболочек в квазиadiaбатическом диапазоне скоростей столкновения 0.3–0.6 а.е. При столкновениях с протонами процесс удаление двух или более электронов даже в результате захвата с ионизацией осуществляется за счет кинетической энергии налетающей частицы. В случае столкновения с альфа-частицей образующаяся квазимолекула имеет не занятый глубокий электронный уровень, образующийся из 1s уровня иона гелия, и удаление дополнительных электронов возможно в результате Оже-процессов либо в квазимолекуле во время ее возникновения, либо в образующихся ионах после их разлета.

В эксперименте фиксировались конечные зарядовые состояния частиц, испытавших столкновение, и угол рассеяния быстрой частицы. Угловое разрешение прибора составляло 5 угловых минут. Измерялись дифференциальные сечения рассеяния быстрой частицы для различных зарядностей медленного иона при фиксированном заряде быстрой частицы. Для исследованного диапазона энергий налетающих частиц процесс ионизации

атома-мишени подавляющем числе случаев сопровождается захватом электрона налетающей частицей. Дифференциальное сечение захвата, измеренное в настоящей работе для энергии 4.5 КэВ и просуммированное по зарядам ионов отдачи, хорошо согласуется с имеющимися в работе [3] полным дифференциальным сечением, измеренным при 5 КэВ, в шкале КэВ*град. Соответствие угла рассеяния и расстояния наибольшего сближения определялось из рассмотрения классического движения быстрой частицы в поле, определяемом потенциалом Хартри-Фока для указанных пар [1, 2] или экранированным кулоновским потенциалом, учитывая плотность электронов согласно уравнению Томаса-Ферми.

При столкновении H^+ с Ag с подавляющей вероятностью осуществляется процесс одноэлектронного захвата осуществляющийся на расстояниях сближения значительно превышающих радиус внешней M-оболочки. При расстояниях сближения меньших этого радиуса вклад процесса захвата с ионизацией составляет порядка 10%. Для пары He^{2+} -Xe процессы захвата двух электронов с ионизацией существенны уже при далеких столкновениях. При порядка радиуса O-оболочки и меньше резко возрастает вероятность процесса захвата двух электронов с дополнительным удалением еще двух электронов, что свидетельствует о захвате из внутренней O-подоболочки Xe и последующем каскаде Оже-процессов.

Список литературы

- [1] Sidis V. *J. Phys. B* **5**, 1517–1528 (1972).
- [2] Kubach C., Sidis V. *J. Phys. B Letter to editor*, **6**, L289–L292 (1973).
- [3] Johnson L.K., Gao R.S., Hakes C.L., Smith K.A., Stebbings R.F. *Phys. Rev. A* **40**, 4920–4924 (1989).

Структурный фазовый переход в NbO_2 . Ренормгрупповой анализ в старших приближениях

К. Б. Варнаиёв

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

Известно, что при температуре $T_c \sim 810^\circ C$ в NbO_2 , имеющем структуру тетрагонального кристалла, происходит непрерывный структурный фазовый переход, в следствие чего симметрия параметра порядка редуцируется от $P4_2/mnm$ в высокотемпературной фазе ($T > T_c$) до $I4_1/a$ в низкотемпературной фазе ($T < T_c$). Методы нейтронного рассеяния, также как рентгеноструктурный анализ показали, что ниже температуры перехода элементарная ячейка кристалла увеличивается в 16 раз а сам переход

описывается четырёхкомпонентным вещественным полем параметра порядка [1].

Для теоретического описания критического поведения структурного перехода в NbO_2 была предложена флуктуационная модель, определяемая обобщённым эффективным гамильтонианом Гинзбурга–Ландау вида

$$H = \int d^D x \left[\frac{1}{2} m_0^2 \sum_{i=1}^4 \varphi_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 (\vec{\nabla} \varphi_i)^2 + u_0 \left(\sum_{i=1}^4 \varphi_i^2 \right)^2 + v_0 \sum_{i=1}^4 \varphi_i^4 + w_0 (\varphi_1^2 \varphi_2^2 + \varphi_3^2 \varphi_4^2) \right], \quad (2)$$

включающим изотропное, кубическое и тетрагональное взаимодействия [2], $m_0^2 \sim T - T_c^0$, где T_c^0 — температура фазового перехода в приближении среднего поля. φ_i — вещественное векторное поле флуктуаций ПП, состоящее из двух, чётной и нечётной, компонент, каждая из которых сама является N -мерным вектором.

Критическое поведение модели (2) было изучено ранее на основе низших приближений метода ренормализационной группы (РГ). Именно в рамках двухпетлевого приближения по ε ($\varepsilon = 4 - D$, D — пространственная размерность) метода Вильсона-Фишера было установлено, что критическая термодинамика структурного перехода в NbO_2 должна управляться анизотропной устойчивой Π -тетрагональной (“уникальной”) фиксированной точкой с специфическим набором критических индексов [2]. Однако расчёты показали, что значения критических индексов уникальной точки совпадают с критическими индексами $O(4)$ -симметричной модели вплоть до ε^2 . Очевидно последнее является следствием грубого двухпетлевого приближения метода РГ, использованного для анализа.

В данной работе строится количественная теория критического поведения модели (2), основанная на вычислении РГ функций в рамках четырёх- и пятипетлевого приближений [3]. Для нахождения координат фиксированных точек уравнений РГ, а также для получения численных оценок значений критических индексов (включая индексы устойчивости нулей β -функций) используется пересуммировочная техника модифицированного преобразования Бореля с конформным отображением [4]. Установлено, что критическая термодинамика структурного фазового перехода в кристалле NbO_2 действительно определяется анизотропной устойчивой Π -тетрагональной фиксированной точкой: $u > 0$, $v > 0$ и $z > 0$ с нетривиальными критическими индексами: $\eta = 0.0343(20)$, $\nu = 0.715(10)$ и $\gamma =$

1.404(25) [5], отличными от критических индексов $O(4)$ -симметричной фиксированной точки. Показано, что полученные численные оценки значений критических индексов хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [6]. Обсуждается также приложение полученных нами качественных и количественных предсказаний к описанию критической термодинамики фазовых переходов в многоподрешёточных антиферромагнетиках $TbAu_2$, DyC_2 и геликоидальных магнетиках Tb , Dy , Ho , которые должны принадлежать к тому же классу универсальности, что и кристалл NbO_2 .

Список литературы

- [1] S. M. Shapiro et al., *Solid State Comm.* **15**, 377 (1974)
- [2] D. Mukamel, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 481 (1975); D. Mukamel and S. Krinsky, *Phys. Rev. B* **13**, 5078 (1976).
- [3] A. I. Mudrov and K. B. Varnashev, *J. Phys. A* **34**, L347 (2001).
- [4] A. I. Mudrov and K. B. Varnashev, *Phys. Rev. E* **58**, 5371 (1998).
- [5] A. I. Mudrov and K. B. Varnashev, *Письма в ЖЭТФ* **74**, 309 (2001); *Phys. Rev. B* **64**, 214423 (2001).
- [6] R. Pynn and J. D. Axe, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, L199 (1976).

Масс-спектрометрия летучих органических соединений с мембранным вводом пробы

О. С. Викторова

Одной из важнейших задач экологии, химии и прикладной химии является количественное определение природных и техногенных летучих органических веществ в масштабе реального времени в потоках нижних и верхних слоев атмосферы над материками и океанами, включая полярные области, в выбросах тектонических разломов в горных районах и на дне мирового океана, в сопутствующем газе при проведении геофизической разведки полезных ископаемых в жестких условиях эксплуатации. Прогресс в области масс-спектрометрии позволяет создавать портативные приборы для проведения измерений химического состава разнообразных проб в экстремальных условиях. Однако и в настоящее время остаются нерешенными проблемы быстрого масс-спектрометрического измерения многокомпонентных смесей. Их решение целесообразно искать в применении современных мембранных материалов, позволяющих радикально увеличить чувствительность портативных анализаторов по летучим органическим компонентам за счет высокой селективной проницаемости мембран. Данные

о химическом составе веществ, полученные из прямого анализа в экстремальных условиях, являются ключевыми для построения теоретических моделей прогнозирования концентраций веществ в объектах окружающей среды. Основные результаты работы:

1. Построена физико-химическая модель дискретного введения пробы в масс-спектрометр через трехмембранную систему ввода. Обоснован выбор дискретного режима масс-спектрометрического анализа, а также выбор параметров систем ввода проб, обеспечивающих быстроедействие и низкие пределы определения при измерении состава многокомпонентных смесей, содержащих *n*-алканы, ароматические органические соединения и их галогенопроизводные портиративным анализатором.

2. Рассчитана принципиальная схема масс-спектрометра с криволинейной выходной границей магнитной линзы и мембранным вводом образца, позволяющая за счет масс-спектрографического режима измерения повысить экспрессность анализа, по сравнению с аналогами, в десятки и сотни раз.

3. Показана возможность эффективного обогащения органических компонентов в процессе дискретного режима ввода пробы в масс-спектрометр через мультимембранную систему, температуры кипения которых не превышают 120 °С, а коэффициенты диффузии превышают величину 1×10^6 см²/с.

Квантовоэлектродинамические поправки к энергии связи в негативном ионе Ека-радона ($Z = 119$)

*И. А. Гойденко*¹, Л. Н. Лабзовский^{1,2}, Е. Eliav³, U. Kaldor³, P. Pyykkö⁴

¹ НИИ Физики им. Фока, СПбГУ

² ПИЯФ, С.Петербург, Россия

³ School of Chemistry, Tel Aviv University, Israel

⁴ Department of Chemistry, University of Helsinki, Helsinki, Finland

В 1996 году при наиболее точных релятивистских численных расчетах был найден негативный ион для сверхтяжелого элемента Ека-радона (ERa), который по своим химическим свойствам должен был быть инертным газом. Энергия связи 119 электрона составляла $-0.064(2)$ eV [1].

В 1999 году были считаны КЭД поправки для тяжелых и сверхтяжелых щелочных металлов для *ns* валентных электронов до $n = 8$ ($Z = 119$) [2, 3]. При этом поправки для валентного электрона в EFr ($Z = 119$) оказались на уровне связи 119 электрона в ERa.

В данной работе были рассчитаны главные КЭД поправки для допол-

нительного электрона в ErA, которые составляют 0.0059(5) eV, или около 9% от энергии связи. Это пока еще не восстанавливает Периодическую Систему Менделеева, но сами поправки являются наиболее важными из всех КЭД поправок для сверхтяжелых элементов.

Список литературы

- [1] E. Eliav, U. Kaldor, Y. Ishikawa, and P. Pyykkö, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5350 (1996).
- [2] P. Pyykkö, M. Tokman, and L. Labzowsky, *Phys. Rev. A* **57**, R689 (1998).
- [3] L. Labzowsky, I. Goidenko, M. Tokman, and P. Pyykkö, *Phys. Rev. A* **59**, 2707 (1999).

Наблюдение отдельных локализованных состояний в твердых растворах $\text{CdS}_{(1-x)}\text{Se}_{(x)}$

Н. Р. Григорьева, Б. В. Новиков

НИИ Физики Санкт-Петербургский Гос. университет

Важную роль в формировании оптических свойств твердых растворов (ТР) играют энергетические состояния экситонов, локализованных флуктуационным потенциалом. В ТР на базе соединений A_2B_6 существует диапазон концентраций, для которого плотность локализованных состояний может быть представлена в виде «хвоста» в запрещенной зоне. В этом случае отдельные локализованные состояния не могут проявляться непосредственно в спектрах поглощения и фотолюминесценции (ФЛ), что затрудняет изучение процессов локализации. Более детальную информацию о свойствах и характеристиках локализованных состояний, можно получить по спектрам возбуждения фотолюминесценции (ВФЛ). В настоящей работе представлены исследования спектров ВФЛ кристаллов $\text{CdS}_{(0.50)}\text{Se}_{(0.50)}$. Исследовались хорошо ограненные кристаллы, которые были получены сублимацией при 1250 К из газовой фазы. Предварительно исходная смесь гомогенизировалась путем многократной возгонки. Образцы имели ясно выраженную форму шестигранников. Спектры ВФЛ были сняты для 24 точек регистрации излучения в спектральном интервале от 2.080 до 2.029 эВ, включающем в себя бесфонную линию и первое фонное повторение. Одновременно были сняты спектры отражения и ФЛ при возбуждении из области собственного поглощения и из области свободного экситона. В спектрах ВФЛ зарегистрированных в области бесфонной линии можно наблюдать особенности, связанные с быстрой релаксацией экситонов с помощью оптических фононов. В спектрах ВФЛ, зарегистрированных в области фонных повторений наблюдаются острые пики. Пики возникают

и смещаются по спектру вслед за смещением длины волны регистрируемого излучения в спектральном интервале от 2.076 до 2.049 эВ. При этом расстояние между спектральным положением пиков и длиной волны регистрируемого излучения всегда остается постоянным. Их поведение и спектральное положение позволяют сделать вывод, что эти пики соответствуют излучению, резонансно возбуждаемых экситонов на отдельные локализованные состояния. Такое излучение происходит испусканием фонона.

Таким образом, впервые наблюдались отдельные локализованные состояния, соответствующие определенным энергиям из хвоста плотности состояний. По спектрам ВФЛ была определена граница между свободными и локализованными экситонами (2,076 эВ), ее положение относительно спектра ФЛ соответствует расчетному, полученному в работе [1] для $\text{TP CdS}_{(0.50)}\text{Se}_{(0.50)}$. Определена длина участка хвоста локализованных состояний, вносящих существенный вклад в излучательную рекомбинацию (27 мэВ). Точно определены энергии актуальных оптических фононов — 20.7 мэВ и 31.4 мэВ.

Работа выполнена при поддержке совместного гранта Минобразования РФ и Администрации Санкт-Петербурга (PD02-1.2-272)

Список литературы

[1] А. А. Клочихин, С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий, *ФТТ* Т. 39, 1170, (1997).

Происхождение и эволюция Фундаментальной Плоскости для эллиптических галактик

Е. А. Евстигнеева

Санкт-Петербургский государственный университет

С целью выяснения вопроса о возможности формирования Фундаментальной Плоскости (ФП) для галактик ранних типов путем слияния маломассивных объектов не находящихся на ней была проведена серия численных расчетов слияний пар галактик, имеющих различные исходные характеристики и различные начальные значения орбитальной энергии и углового момента. При слиянии маломассивных галактик была использована схема последовательных недиссипативных слияний. В вычислениях использовалось не менее 100000 частиц на каждую галактику, что позволило получить характеристики результатов слияний (эффективный радиус и эффективную поверхностную яркость) с высокой точностью.

Как оказалось, эффективная поверхностная яркость всегда возрастает с эффективным радиусом (остаток слияния не попадает на ФП, характе-

ристики остатка слияния удаляются от ФП) и положение остатка слияния на плоскости фотометрических параметров зависит от начальной орбитальной энергии пары. Это показывает, что мы не можем получить галактики на ФП, сливая маломассивные эллиптические галактики (без учета диссипативных процессов). Еще один вывод — современные эллиптические галактики не могут быть получены слиянием объектов, подобных современным карликовым галактикам ранних типов. Если считать, что окружающие нас эллиптические галактики сформировались при слияниях протогалактик, то эти протообъекты должны были иметь более высокую плотность, чем современные карликовые галактики.

Мы попробовали промоделировать слияние двух галактик, принадлежащих ФП. Оказалось, что в результате последовательных слияний ФП сохраняется (остаток слияния двух галактик, находящихся на ФП, также оказывается на ФП). Нами также была проведена серия расчетов по слиянию объектов, лежащих выше ФП. В ближайшей области Вселенной таких объектов нет, но они могли существовать в более ранние эпохи. Оказалось, что характеристики остатков слияния также имеют тенденцию удаляться от ФП. Наклон прямой, проведенной через положения остатков слияний на плоскости фотометрических параметров, круче, чем наклон ФП. Это означает, что результат слияний может оказаться на ФП. Влияние скрытой массы (дополнительного внешнего потенциала), которая, возможно, присутствует в сливающихся галактиках, изучалось в отдельной серии расчетов. Первые пробные расчеты с добавлением гало к маломассивным сферическим галактикам показали, что остатки слияния также смещаются вниз от ФП. Таким образом, основной вывод о невозможности получить объект на ФП при слияниях маломассивных галактик, лежащих ниже ее, подтверждается и моделями со скрытой массой.

Влияние электрических дрейфов на перенос примесей в пристеночной плазме токамака

Е. Г. Кавеева

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Описание переноса примесей в пристеночной области является одной из важнейших задач, стоящих на пути к созданию термоядерного реактора, так как появление ионов примеси в реакторе неизбежно, поскольку они распыляются со всех поверхностей, контактирующих с горячей плазмой, а проникшие в центральную плазму тяжелые ионы могут переизлучить значительную часть энергии и даже привести к срыву разряда.

В данной работе проведено численное моделирование примеси углерода для различных режимов работы токамака ASDEX-Upgrade. Характерные параметры моделирования соответствуют L-режиму. Было сделано несколько расчетов с включенными и выключенными электрическим и диамагнитным дрейфами для выяснения их роли в распределении примеси.

Выяснено, что заметная часть нейтральных атомов углерода проникает до уровня сепаратрисы (последней замкнутой магнитной поверхности). Снаружи от сепаратрисы примесь ионизируется до C^{1+} – C^{3+} и затем эффективно увлекается основными ионами к пластинам дивертора. Распределение концентрации определяется источником за счет ионизации низших зарядовых состояний и рекомбинации C^{4+} , аномальной радиальной диффузией примеси и скоростью основных ионов.

Внутри сепаратрисы основными ионизационными состояниями оказываются C^{4+} – C^{5+} . Источник ионов C^{4+} расположен в нижней части магнитной поверхности, поэтому в отсутствие дрейфов максимум концентрации примеси расположен там же. Ширина этого максимума определяется радиальной и продольной диффузией и распределением источника (нейтрального углерода). После включения дрейфов распределение примеси по полоидальному углу становится более однородным и в некоторых случаях появляется новый максимум концентрации в верхней части магнитной поверхности или вблизи внутреннего обвода. Построена аналитическая модель для описания поведения примесей внутри сепаратрисы, объясняющая их полоидальное распределение. Средняя концентрация примеси по магнитной поверхности определяется аномальной радиальной диффузией и ионизационным источником.

Особенности получения и конструирования ассиметричных гибридных гетероструктур на основе соединений III–V и II–VI

В. Кайгородов

ФТИ им. А. Ф. Иоффе

Мощные полупроводниковые лазеры, работающие в среднем ИК диапазоне, являются объектами повышенного внимания, вследствие возможности их применения в таких областях деятельности, как лазерная спектроскопия, беспроводная оптическая связь, мониторинг окружающей среды, медицина и другие. На настоящий момент выявлены основные типы перспективных материалов и гетероструктур, однако до сих пор так и не получена лазерная генерация при комнатной температуре. Наилучшие результаты были получены в антимонидных III–V гетероструктурах типа II с

W-образным расположением квантовых ям, которые показали генерацию при 195 К на длине волны $l = 3.25$ мкм при непрерывной инжекционной накачке. Основными проблемами, препятствующими расширению температурного диапазона работы этих лазеров, являются безызлучательные потери на Оже-рекомбинацию и внутризонное поглощение, а также большие токовые утечки, возникающие вследствие недостаточного электронного ограничения дырок. Для решения этой проблемы нами была предложена оригинальная гибридная двойная гетероструктура AlGaAsSb/InAs/CdMgSe с гетеровалентным интерфейсом III-V/II-VI на границе активной области на основе InAs, обеспечивающим более чем 1.5 эВ барьер для дырок. К другим преимуществам такой структуры относятся идеальное согласование параметров решетки Cd_{0.9}Mg_{0.1}Se и InAs, а также огромная разница показателей преломления ($n_{\text{InAs}} = 3.4$, $n_{\text{CdSe}} = 2.55$), позволяющая достичь сильного оптического ограничения излучения в InAs. Структуры, состоящие из III-V (AlGaAsSb/InAs) и II-VI (CdMgSe) частей, были получены путем двух-ступенчатого роста методом молекулярно-пучковой эпитаксии. В ходе эксперимента были апробированы различные варианты начальных стадий роста II-VI части (низкотемпературная эпитаксия с повышенной миграцией атомов для роста CdMgSe и использование тонкого буферного слоя ZnTe), которые позволили сформировать III-V/II-VI интерфейс в активной области лазерной структуры с низкой плотностью структурных дефектов. Также были проведены теоретические и экспериментальные исследования взаимного расположения зон в гетероструктуре AlGaAsSb/InAs/CdMgSe, которые показали, что гетеропара InAs/CdSe является гетеропереходом II рода, в котором зона проводимости InAs лежит на ~ 60 мэВ выше, чем у CdSe, в то время как добавление Mg в матрицу CdSe трансформирует гетеропереход InAs/CdMgSe в тип I. Главным результатом работы является демонстрация в двойной гибридной гетероструктуре (Al,Ga)SbAs/InAs/(Cd,Mg)Se лазерной генерации на длине волны $l = 2.775$ мкм при инжекционной накачке при температуре 77 К.

Сверхизлучение Дике и промежуточная фаза при переходе от спонтанного излучения к вынужденному в полупроводниковых лазерах с квантоворазмерной активной областью

Л. Я. Карачинский

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Разрабатываемая модель строится на возможности существования в полупроводниках при определенных условиях так называемого сверхизлучения.

Суть эффекта сводится к спонтанной фазировке тесно расположенных диполей (роль которых в полупроводнике играют электрон-дырочные пары) и формированию из них объединенного L макродиполя, эффективность излучения которого пропорциональна квадрату числа входящих в него элементарных диполей. Это приводит к лавинообразному нарастанию интенсивности излучения и, соответственно, формированию короткого когерентного импульса света.

Проведенное теоретическое рассмотрение было основано на допущении, что концентрация неравновесных носителей заряда в активной области гетероструктуры на квантовой яме может флуктуировать вокруг некоторого среднего значения в некотором выделенном направлении (лежащем в плоскости ямы). Такие флуктуации могут приводить к образованию доменов с повышенной концентрацией носителей, что, в свою очередь, приводит к локализации электромагнитного поля внутри доменов.

Диэлектрическая восприимчивость зависит от концентрации носителей, причем, внутри домена восприимчивость должна быть положительна, а снаружи отрицательна. Таким образом, для того, чтобы вычислить размер домена, необходимо приравнять нулю выражение для диэлектрической восприимчивости, в котором учтена ее зависимость от концентрации неравновесных носителей заряда. При этом можно показать, что равенство нулю диэлектрической восприимчивости равносильно равенству нулю коэффициента усиления. В этих вычислениях был использован формализм матрицы плотности.

Было вычислено выражение для концентрации неравновесных носителей в квантовой яме, которое учитывало сильное вырождение электронов и слабое вырождение дырок. Зависимость концентрации от координаты в выбранном направлении (x) внутри домена была выбрана в простой экспоненциальной форме. Итоговое выражение для концентрации было подставлено в условие равенства нулю усиления в квантовой яме. В аналитическом виде было получено выражение, а решение соответствующего уравнения дало нам величину x , соответствующую размерам домена. Эта величина составила примерно 34 мкм для квантовой ямы $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$. Характеристическое время излучения, соответствующее данному размеру, было рассчитано с учетом скорости света в материале. Было получено время 0.35 пс, которое находится в хорошем согласии с полученными ранее из экспериментальных данных значениями.

Полученные нами в последнее время теоретические результаты совместно с ранее полученными экспериментальными данными позволили сформулировать модель, описывающую переход гетеролазера в режим ла-

зерной генерации. Нами было высказано предположение, что переход от спонтанного излучения к лазерной генерации для случая полупроводниковых лазеров может быть описан в рамках теории фазовых переходов.

При таком рассмотрении режим сверхизлучения играет важную роль в работе инжекционного лазера, являясь промежуточным между спонтанной и лазерной генерацией. Режим сверхизлучения возникает из режима спонтанного излучения с образованием доменов (связанных с возникновением сильных флуктуаций электромагнитного поля). Вышеназванные домены являются зародышами фазы лазерной генерации. С ростом тока накачки размер образовавшихся доменов растет и в какой-то момент они должны соприкоснуться. В рамках наших рассуждений именно в этот момент и возникает лазерная генерация.

Защита овощной продукции биопрепаратами

Е. И. Кипрушкина

Санкт-Петербургский государственный университет низкотемпературных и пищевых технологий

Главная причина повышенного внимания к развитию биотехнологии состоит в тенденции к общей экологизации природопользования, что обусловлено заботой человечества об охране окружающей среды и рациональном, более эффективном использовании природных ресурсов.

В СПГУНиПТ совместно с ВНИИ сельскохозяйственной микробиологии проводились многолетние исследования антагонистической активности бактерий родов *Pseudomonas*, *Mycobacterium*, *Bacillus* различных штаммов по отношению к фитопатогенам картофеля и овощей, изучали влияние биообработки клубне-корнеплодов на защитные механизмы, физиолого-биохимические процессы, качество и лежкость при длительном холодильном хранении.

Установлено, что обработка картофеля и овощей биологическими средствами защиты стабилизирует физиолого-биохимические процессы в растительной ткани, что позволяет максимально сохранить биологически активные и пищевые вещества в течение длительного времени.

Показано, что бактерии-антагонисты активизируют защитные реакции растительного организма: интенсивнее идет накопление пектинов, суберина, фенольных соединений, образуется большее число клеточных рядов раневой перидермы, повышается активность оксидаз, ускоряется синтез фитоалексинов. Выход стандартных клубней после 8 мес. хранения выше в среднем на 16–17 процентов относительно контроля, корнеплодов моркови выше на 6–18 процентов.

Динамический модуль и вязкость макромолекул дендримера

Д. А. Маркелов¹, Ю. Я. Готлиб²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,

² Институт высокомолекулярных соединений РАН Е. М. Аракчеева

В теоретических работах [1–3] было показано, что релаксационный спектр состоит из двух основных областей: внутреннего спектра, соответствующего квазипериодическим модам, и пульсационного, отвечающего пульсационным движениям дендримера по отношению к центру. В настоящей работе исследованы временные и частотные зависимости динамического модуля для дендримера с различным числом поколений ($n = 2, \dots, 7$) и при разной функциональности узлов ($F = 3, \dots, 6$). Рассматривается влияние внутреннего трения на вязкоупругие свойства дендримера.

Установлено [4], что временная зависимость релаксационного модуля в области малых времен определяется внутренним спектром, который практически не зависит от числа сегментов в дендримере (см. [2]), поэтому время уменьшения релаксационного модуля в e -раз слабо изменяется с ростом числа поколений дендримера и при увеличении функциональности узла. Рост внутреннего трения замедляет убывание релаксационного модуля. В области больших времен (или малых частот) модуль упругости и модуль потерь зависят от вклада пульсационного спектра, ширина которого увеличивается с ростом числа сегментов в дендримере (см. [2]), и изменяются с ростом числа поколений дендримера и увеличением функциональности узлов. Показано, что статическая вязкость линейно возрастает с увеличением числа поколений в дендримере. Учет внутреннего трения уменьшает статическую вязкость при любом числе поколений на приблизительно одинаковую величину. Коэффициент пропорциональности между статической вязкостью и числом поколений в дендримере увеличивается при росте функциональности узла.

Работа выполнена также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (02-03-33132), гранта INTAS (00-712) и программы ESF «SUPERNET».

Список литературы

- [1] C. Cai, Z. Y. Chen, *Macromolecules* **30**, 5104 (1997).
- [2] Ю. Я. Готлиб, Д. А. Маркелов, *Высокомолек. соед. Сер. А* **44**, № 12, 2205–2216 (2002).
- [3] Yu. Ya. Gotlib, D. A. Markelov, *4th International Symposium "Molecular Order and Mobility in Polymer Systems"*, St. Petersburg, Russia, June 3–7, 2002, Book of Abstract. P-243

- [4] Ю. Я. Готлиб, Д. А. Маркелов, *IX Всероссийская Конференция «Структура и динамика молекулярных систем, Яльчик-2002»*, Йошкар-Ола–Уфа–Казань–Москва, 2002, Сборник статей конференции. Т. 1 С. 150–153.

Исследование электрических свойств 4H-SiC эпитаксиальных слоев облученных высокоэнергетичными тяжелыми ионами Kr⁺

Г. А. Онушкин

ФТИ им. А. Ф. Иоффе

Карбид кремния (SiC) является одним из наиболее перспективных широкозонных полупроводников для создания высоковольтных, высокочастотных и мощных приборов, способных работать при повышенных температурах, в условиях повышенной радиации и химической агрессивности среды. Изучение природы и свойств примесных и дефектных центров остро необходимо для изготовления и совершенствования приборов на основе SiC, способных применяться в ядерной промышленности. Достаточно много исследований было проведено по изучению структурных, оптических и электрических свойств образцов карбида кремния, облученных электронами, протонами и низкоэнергетичными ионами. Гораздо меньше внимание было уделено исследованию влияния облучения высокоэнергетичными (сотни МэВ) тяжелыми ионами. Отличие данного вида облучений от вышеуказанных заключается в механизме торможения тяжелых ионов, которое характеризуется большим количеством энергии, передаваемой электронной подсистеме кристалла. При этом можно ожидать, что образуемые в кристалле дефекты будут отличаться от радиационных дефектов, образуемых после взаимодействия с легкими частицами.

В данной работе было проведено исследование электрических свойств образцов карбида кремния политипа 4H, облученных высокоэнергетичными 245 МэВ ионами криптона (36 Kr⁺). Показано, что после облучения концентрация нескомпенсированных доноров уменьшается более чем в полтора раза, концентрация глубокого уровня «Z1» увеличивается практически на два порядка, появился не идентифицированный глубокий уровень с энергией $E_c - E_{\text{г}} = 0.43$ эВ, который был отождествлен при прогреве до температуры равной 620 К. Прямое сопротивление барьера Шоттки после облучения увеличивалось при нагреве образца до температуры 560 К, а потом уменьшалось, что можно связать с явлением так называемого «отрицательного» отжига. Сравнение полученных результатов с литературными

данными о свойствах других радиационных дефектов указывают на отличие дефектов, образуемых после облучения ионами Kg^+ от дефектов после облучений легкими частицами.

Киральные фазовые переходы: критическое поведение, контролируемое устойчивым фокусом

П. Калабрезе¹, Е. В. Орлов², П. Парруччини³, А. И. Соколов²

¹ Высшая нормальная школа, Пиза, Италия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

³ Пизанский университет, Пиза, Италия

Существует обширный класс систем, теоретическое описание критической термодинамики которых сегодня не может считаться удовлетворительным. К ним относятся магнетики с геликоидальными видами упорядочения, слоистые антиферромагнетики с треугольными подрешетками и т.п. Для этих объектов характерно наличие конкурирующих взаимодействий, порождающих упорядоченные фазы с той или иной степенью фрустрации, а попытки теоретически исследовать их критическое поведение ведут к противоречивым результатам. Так, данные, полученные методом Монте-Карло и в низшем порядке перенормированной теории возмущений, говорят о том, что в физически интересных случаях фазовые переходы в киральные фазы должны быть непрерывными и принадлежать к некоторому новому — киральному — классу универсальности со специфическим набором критических индексов [1, 2]. Однако результаты ренормгруппового (РГ) анализа в трехпетлевом приближении свидетельствуют о неустойчивости киральных фазовых переходов и об их превращении в переходы I рода при физических значениях размерности параметра порядка ($N = 2$ и $N = 3$) [3, 4].

В настоящей работе критическая термодинамика двумерной и трехмерной киральных моделей исследована в рекордно высоких — пяти- и шести-петлевом приближениях. Наши результаты согласуются с тем фактом [5, 6], что в высших приближениях уравнения РГ вновь обретают устойчивую фиксированную точку в секторе киральных переходов, которая, однако, генетически не связана с устойчивой фиксированной точкой, обнаруженной ранее в низших порядках. Детальный анализ природы киральной фиксированной точки при $N = 2$ и $N = 3$ позволил нам установить, что эта точка является фокусом [7, 8], а не узлом, как для других анизотропных моделей. Наличие устойчивого фокуса на фазовом портрете уравнений РГ приводит к появлению спиралевидных фазовых траекторий, а это означает, что выход системы на критическую асимптотику здесь носит слож-

ный немонотонный характер. Такой необычный сценарий позволяет весьма естественно объяснить сильный разброс эффективных значений киральных критических индексов, получаемых в многочисленных физических (натурных) и машинных экспериментах.

Список литературы

- [1] H. Kawamura. *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 4707 (1998).
- [2] A. Pelissetto, E. Vicari. *Phys. Rep.* **368**, 549 (2002).
- [3] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov. *Phys. Rev. B* **49**, 15901 (1994).
- [4] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov, K.B. Varnashev. *Phys. Lett. A* **208**, 161 (1995).
- [5] A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. *Phys. Rev. B* **63**, 140414 (2001).
- [6] P. Calabrese, P. Parruccini. *Phys. Rev. B* **64**, 184408 (2001).
- [7] P. Calabrese, P. Parruccini, A.I. Sokolov. *Phys. Rev. B* **66**, 180403, (2002).
- [8] P. Calabrese, E.V.Orlov, P. Parruccini, A.I. Sokolov. *Phys. Rev. B* **67**, 024413, (2003).

Двумерная нелинейная теория корреляционной рефлектометрии

Е. З. Гусаков, А. Ю. Попов
ФТИ им. А Ф Иоффе РАН

Одним из распространенных методов исследования микротурбулентности в плазме токамака является корреляционная рефлектометрия [1]. Интерпретация экспериментальных данных, полученных с помощью этой диагностики, основана на физической концепции, согласно которой рассеяние происходит в окрестности точки отсечки на длинноволновых флуктуациях, доминирующих в спектре. Вместе с тем линейная двумерная [2] и нелинейная одномерная [3] теоретические модели предсказывают, что в этой диагностике доминирует не рассеяние назад в точке, где выполняются резонансные условия Брэгга, а малоугловое рассеяние вдоль всего оптического пути зондирующей волны. В линейном случае, когда уровень турбулентности низок, это ставит под сомнение такие характеристики рефлектометрии, считавшиеся ее бесспорным преимуществом, как локальность и возможность разрешения по радиальным волновым векторам флуктуаций [2]. Однако в сильно нелинейном случае при высоком уровне флуктуаций корреляционные измерения позволяют получать локальную информацию из окрестности точки отсечки [3].

В настоящей работе нами была развита нелинейная двумерная теория, основанная на тех же предположениях, что и в [3]. Многократное малоугловое рассеяние описывается в рамках ВКБ приближения, как результат случайных изменений фазы зондирующей волны в среде с флуктуациями.

Проанализированы различные экспериментальные реализации данной диагностики. Получены аналитические выражения для корреляционной функции двух зондирующих сигналов, имеющих близкую частоту, и икстинкции зондирующего сигнала, в случае, когда существенна вторичная дифракция.

Список литературы

- [1] R. Nazikian, E. Mazzucato. *Rev. Sci. Instrum.* **66**, 392 (1995).
- [2] E. Z. Gusakov, M. A. Tyntarev. *Fusion Engineering and Design* **34-35**, 501 (1995).
- [3] E. Z. Gusakov, A. Yu. Popov, *Plasma Phys. Contr. Fusion* **44**, 2327–2337 (2002).

Исследование релаксации электронных возбуждений в люминофорах, легированных празеодимом

А. С. Потанов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Экспериментальное и теоретическое исследование излучательных каскадных процессов в твердых телах позволит создать люминофоры с квантовой эффективностью выше единицы. Такие люминофоры необходимы прежде всего для повышения эффективности плазменных дисплейных панелей и разработки безртутных люминесцентных ламп.

Решение проблемы требует детального понимания процессов взаимодействия примесного (активаторного) центра с окружением в кристалле и влияния этого взаимодействия на вероятность излучательных переходов в каскадных процессах.

Люминесцентные свойства иона трехвалентного празеодима в значительной мере зависят от матрицы, в которую он введен в качестве активатора. В соединениях с сильным для этого иона кристаллическим полем регистрируется широкая полоса люминесценции, за которую ответственны переходы $5d \rightarrow 4f$ [1]. Однако, имеются соединения в которых регистрируются только люминесцентные линии, соответствующие излучательным переходам с 3P терма $4f$ конфигурации Pf^{3+} . В соединениях со слабым кристаллическим полем возможна ситуация при которой верхний возбужденный $4f$ уровень (1S_0) расположен энергетически ниже смешанной $4f5d$ конфигурации. В этом случае возможна регистрация каскадной эмиссии фотонов (КЭФ), то есть последовательного излучения двух фотонов ионом Pf^{3+} [2, 3].

Показано, что возможность каскадной эмиссии фотонов напрямую связана с процессом релаксации электронных возбуждений в кристаллах с участием горячих и термализованных носителей, генетических электронно-дырочных пар, свободных и автолокализованных экситонов, плазмонов,

метастабильных точечных дефектов, а также с переносом энергии от этих возмущений к центрам люминесценции [4].

Список литературы

- [1] J.K. Lawson, S.A. Payne, *Opt. Materials* **2**, 225–232 (1993).
- [2] P.A. Rodnyi, C.W.E. van Eijk, A.N. Mishin, S.B. Mikhlin, A.G. Avanesov, A.S. Potapov, *Proc. SPIE*, 4766-24, pp. 165–170, 2002.
- [3] П.А. Родный; А.Н. Мишин; А.С. Потапов, *Оптика и спектроскопия Спектроскопия твердого тела*, **93**, 775–782 (2002).
- [4] П.А. Родный; А.Н. Мишин; С.Б. Михрин; А.С. Потапов, *ПЖТФ* **28**, вып. 23, 39–43 (2002).

Магнитные квазищели в гетеропереходах III-го рода

К. С. Романов

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

В настоящее время экспериментально и теоретически исследуются свойства одиночных гетеропереходов II-го рода на основе $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Sb}_{1-y}\text{Al}_y/\text{InAs}$. С фундаментальной точки зрения эта система уникальна тем, что в ней на гетерогранице реализуется полуметалл, состоящий из пространственно разделенных полупроводников с р и n типами проводимости [1]. Вблизи их интерфейса волновые функции гибридизуются и в валентной зоне одного материала и зоне проводимости другого образуются состояния, которые имеют свойства и электронов и дырок. Целью данной работы являлась разработка простой модели, позволяющей количественно описывать спектр гетероперехода в области перекрытия зон как в нулевом, так и в ненулевом магнитном поле.

Строго говоря, одиночные гетеропереходы с перекрывающимися зонами должны рассчитываться самосогласовано. Тем не менее, можно избежать больших сложностей и учесть характерные особенности системы, заменив ее на гетеропереход II-го рода, зажатый в квантовой яме с бесконечными стенками.

Для расчета такой системы была использована модель Кейна с учетом только линейных слагаемых по \vec{k} . Гамильтониан Кейна, позволяет сформулировать граничные условия на интерфейсе в виде непрерывности электронной компоненты волновой функции и дырочной z компоненты. Учет только линейных слагаемых по k позволил сократить количество граничных условий и таким образом значительно упростил расчет. Нами было получено аналитическое дисперсионное уравнение, построены кривые зависимости энергии гибридизованных состояний в системе от продольного импульса и поперечного интерфейсу магнитного поля.

Учет недиагональных матричных элементов между электронными и дырочными компонентами волновой функции в гамилтониане Кейна приводит к гибридизации электронных состояний одного полупроводника и дырочных состояний другого. Состояния смешиваются и теряют ярко выраженный дырочный или электронный характер. На дисперсионных кривых это выражается в виде зазора, формирующегося на месте пересечения дырочного уровня $Ga_{1-x}In_xSb_{1-y}Al_y$ и электронного InAs. Впервые наличие этого зазора для сверхрешеток из гетероперехов II-го рода было предсказано в работе [2].

В магнитном поле также имеет место гибридизация, что также выражается в формировании энергетических зазоров. Антипересечения появляются только между уровнями Ландау электронов и дырок с одинаковым номером. В результате антипересечений возникает ряд квазищелей в которых плотность состояний значительно меньше обычной.

Полученные результаты качественно согласуются с результатами других авторов и объясняет сложность экспериментальной картины осцилляций Шубникова–де Гааза.

Список литературы

- [1] G. H. Dohler, *Surface Science* **98**, 108–116 (1980).
- [2] M. Altarelli, *Phys. Rev. B* **28**, 842–845 (1983).
- [3] K. D. Moiseev, V. A. Berezovets, M. P. Mikhailova, V. I. Nizhankovskii, R. V. Parfeniev, Yu. P. Yakovlev, *Surface Science* 482–485 (2001).

Моделирование электрических свойств поликристаллических керамических полупроводников

И. В. Рожанский

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Поликристаллические керамические полупроводники на основе $BaTiO_3$, $SrTiO_3$ и др. являются фундаментальными материалами, используемыми в различных областях микроэлектроники. Благодаря сильно нелинейной вольт-амперной характеристике эти материалы применяются для создания варисторов, детекторов и переключателей. Обладая большой величиной диэлектрической проницаемости, они также используются для создания компактных конденсаторов. Поликристаллические керамические полупроводники имеют сложную зернистую структуру, при этом ключевую роль в формировании их электрических характеристик играют межзеренные границы. Диффузия компенсирующей примеси вдоль межзеренных границ в однородно-легированном поликристаллическом полупроводнике приводит

к возникновению на границах зёрен несбалансированного электрического заряда, формирующего двойной барьер Шоттки [1]. Ширина и высота барьера определяются концентрацией компенсирующей примеси на границе, причем небольшие вариации этой концентрации могут изменять электрическую проводимость границы на несколько порядков, таким образом один и тот же материал может быть использован для создания резистора, емкости или нелинейных элементов варисторного типа. Благодаря этому существует перспектива создания на основе полупроводниковых керамик интегральных схем пассивных элементов [2].

В данной работе предложена численная модель, позволяющая рассчитывать электрические свойства поликристаллических керамических полупроводников. Первая часть модели позволяет проводить расчет электрических свойств одной межзеренной границы с заданным профилем концентрации легирующей примеси. Равновесные распределения потенциала и носителей заряда находятся путём численного решения уравнения Пуассона совместно с уравнениями для концентраций свободных носителей и ионизованных примесных центров в рамках фермиевской статистики. Расчет транспорта через межзеренную границу реализован с помощью одномерной динамической диффузионно-дрейфовой модели. Релизованная численная схема решения уравнения непрерывности электрического тока совместно с уравнением Пуассона позволяет вычислить как стационарный ток через границу, так и зависимость основных характеристик системы от времени. Расчет изменения профиля зарядовой плотности при изменении напряжения, приложенного к границе, позволяет вычислить емкость приграничной области. Вторая часть модели реализует переход от одной межзеренной границы к характеристикам поликристаллического образца, образуемого статистическим ансамблем зерен. Модель зернистой структуры реализована на основе сетки Вороного [3]. Для каждой границы соответствующая плотность тока j и удельная емкость c могут быть вычислены при известной разности потенциалов между зёрнами ΔU и концентрации примеси на границе с помощью первой части модели. Для расчета электрических характеристик всего образца каждая межзеренная граница заменяется соответствующим нелинейным элементом с известными зависимостями $I(\Delta U)$ и $C(\Delta U)$. Интегральная вольт–амперная и вольт–фарадная характеристики системы находятся путём решения системы нелинейных уравнений Кирхгофа для полученной сетки элементов.

Список литературы

- [1] R. Waser, R. Hagenbeck, *Acta mater.* **48**, 797 (2000)

[2] N. Setter, *J. Europ. Ceram Soc.* **21**, 1279 (2001).

[3] M. Bartkowiak, G. D. Mahan, *Phys. Rev.* **B51** 10825 (1995).

Динамическая эволюция неиерархических кратных звездных систем. Тенденции, устойчивые к выбору начальных условий

А. В. Рубинов

Санкт-Петербургский государственный университет

Проведено численное моделирование динамической эволюции неиерархических кратных звездных систем, состоящих из $N = 6$ компонентов, в рамках гравитационной задачи N тел с учетом возможных слияний звезд и уходов одиночных и двойных звезд из системы. Исследовано влияние начальных глобальных параметров систем (спектр масс, средний размер, вириальный коэффициент, вращение системы) на их динамическую эволюцию. Произведен анализ распределения по состояниям на момент времени 300 начальных времен пересечения системы. Исследованы характеристики формирующихся двойных и устойчивых тройных систем, а также уходящих одиночных и двойных звезд.

Можно выделить следующие особенности динамической эволюции неиерархических кратных систем, устойчивые к изменению начальных условий:

- Эволюция системы заканчивается, как правило, формированием двойной системы. Доля устойчивых тройных систем довольно высока и составляет 10–15%.
- Распределения эксцентриситетов финальных и уходящих двойных могут быть описаны законом $f(e) = 2e$.
- В устойчивых тройных системах эксцентриситеты внешних двойных в среднем меньше эксцентриситетов внутренних двойных ($\overline{e_{in}} \approx 0.7$, $\overline{e_{ex}} \approx 0.5$).
- Устойчивые тройные системы обладают довольно сильной иерархией (отношение больших полуосей внешних и внутренних двойных составляет в среднем 20:1).
- Преобладают тройные системы с прямыми движениями.
- Часто наблюдаются уходы одиночных и двойных звезд из системы со скоростями достигающими нескольких десятков км/с, что позволяет объяснить существование молодых звезд-«бегунов» типа Т Тау.

Позиционное клонирование районов хромосом, контролирующих количественные признаки у кур

А. А. Сазанов^{1,2}, В. А. Царева², А. Ф. Смирнов^{1,2}, Б. Вардецка³, М. Корчак³, К. Яшак³, М. Н. Романов⁴

¹ Биологический НИИ Санкт-Петербургского государственного университета

² Всероссийский НИИ генетики и разведения животных РАСХН

³ Институт генетики и разведения животных Польской академии наук, Варшава — Волка Косовска, Польша

⁴ Отд. микробиологии, Гос. университет штата Мичиган, Ист-Лансинг, США

Большинство хозяйственно ценных признаков домашних животных имеют сложный полигенный тип наследования и контролируются многими генами, расположенными в локусах QTL (quantitative trait loci). Изучение комплексной молекулярной архитектуры QTL представляет интерес с точки зрения общей генетики. Кроме того, данные о нуклеотидных последовательностях из районов QTL могут быть использованы в практическом животноводстве для селекции с помощью молекулярных маркеров (marker assisted selection, MAS).

В настоящее время нами проведен ряд экспериментов по позиционному клонированию двух районов хромосомы 4 домашней курицы, содержащие QTL толщины скорлупы на 53 недели жизни (ST53) и массы белка в яйце на 33 неделе (AW33). Указанные признаки различаются у двух линий кур (польская зеленоногая и род-айленд) на 3,3% и 7,5%, соответственно. Показано сцепление признака AW33 с микросателлитным маркером MCW170 (генетическое расстояние 1сМ) и практически полное сцепление QTL ST53 с микросателлитным маркером MCW114. С использованием баз данных компьютерной сети Интернет показана локализация количественного признака AW33 в пределах интервала, ограниченного микросателлитными локусами MCW0170 и LEI0081, и QTL ST53 внутри района с границами MCW0114 и ADL0241. Проведен скрининг гридированной геномной ВАС-библиотеки курицы 031-JF256-BI (<http://hbz.tamu.edu>) с использованием в качестве ДНК-зондов меченых α -32P-dCTP последовательностей микросателлитов MCW0170, LEI0081, MCW0114 и ADL0241. Графическая обработка результатов скрининга проведена при помощи сканера FX-scan и пакета компьютерных программ Quantity One. Определены координаты двадцати клонов, имеющих гомологию последовательностей ДНК вставки с микросателлитными локусами MCW0170, LEI0081, MCW0114 и ADL0241.

Полученные данные позволяют «заякорить» районы QTL на детально разработанных сравнительных генетических картах «человек-мышь» на осно-

ве гомологии и, возможно, выявить гены, ответственные за QTL толщины скорлупы и массы белка в яйце.

Перепутывание и сжатие в спиновых подсистемах многоатомных ансамблей

Д. В. Куприянов, И. М. Соколов, *А. В. Славгородский*

Санкт-Петербургский государственный технический университет

В последние годы наблюдается все возрастающий интерес к задачам квантовой информации, объединяющей направления квантовой криптографии, квантовой телепортации и квантового компьютера, который обусловлен как несомненными успехами в проведении демонстрационных экспериментов, так и более глубоким пониманием практической важности самой проблемы (Bouwmeester D., Ekert A., Zeilinger A., *The Physics of Quantum Information*.// — Springer-Verlag Heidelberg New York, 2000.) Основной физической концепцией в построении любой квантовой информационной схемы является перепутывание квантовых состояний или несепарабельность матрицы плотности пространственно разделенных физических объектов. Использование для этой цели систем, описываемых непрерывными переменными, является достаточно перспективным направлением, характеризующимся большим набором физических примеров и экспериментальных реализаций

В настоящей работе обсуждается одна из возможных физических реализаций системы непрерывных переменных в спиновых подсистемах двух пространственно разделенных макроскопических атомных ансамблей. В качестве основного процесса по созданию перепутывания рассматривается кооперативное комбинационное рассеяние пары коррелированных фотонов на паре пространственно разделенных атомов. Если рассеиваемые фотоны являются фотонами-близнецами, рожденными в результате какого-либо параметрического процесса, то существующие между ними корреляции частично передаются в атомную подсистему.

Показано, что рассеивание пар фотонов-близнецов на пространственно разделенных атомных ансамблях приводит к возникновению жестких корреляций между макроскопическими флуктуациями поперечных проекций коллективных спинов этих ансамблей. Также показано, что данный механизм можно использовать для создания спинового сжатия в макроскопическом ансамбле.

Исследование процессов однофотонного и двухфотонного тормозного излучения при рассеянии релятивистских заряженных частиц на изолированных атомах и ионах

И. А. Соловьев

Санкт-Петербургский государственный морской технический университет

Цель проекта заключалась в теоретическом исследовании процессов однофотонного и двухфотонного тормозного излучения (ТИ) бесструктурных релятивистских заряженных частиц на изолированных атомах и ионах в широком диапазоне скоростей столкновений (вплоть до ультрарелятивистских) и частот испускаемых фотонов.

В рамках проекта:

1. Впервые предложен релятивистский формализм для описания процесса однофотонного ТИ при упругом столкновении заряженной частицы с многоэлектронной мишенью, учитывающий оба основных механизма излучения — обычный и поляризационный, а также их интерференцию. Получены парциальные и мультипольные разложения для амплитуды и сечения процесса, учитывающие релятивистские эффекты и эффекты излучения фотонов высокой мультипольности.

2. Впервые проведены расчеты спектральных и угловых характеристик процесса однофотонного поляризационного ТИ, возникающего при рассеянии заряженных частиц (протонов) на изолированных атомах и ионах для релятивистских энергий столкновения в широком диапазоне частот излученных фотонов. Проанализированы особенности, возникающие в спектре поляризационного ТИ в ультрарелятивистском случае.

3. Предложен новый релятивистский подход, основанный на использовании метода Штернхаймера для описания процесса двухфотонного ТИ при потенциальном рассеянии релятивистской заряженной частицы.

4. Проанализированы особенности в релятивистских однофотонных матричных элементах между состояниями непрерывного спектра. Представлено релятивистское обобщение дельта-приближения.

5. Разработан эффективный метод приближенного расчета сечений двухфотонного ТИ, учитывающий структуру релятивистских однофотонных матричных элементов, применимый в широкой области частот фотонов и энергий налетающей частицы, с помощью которого произведены расчеты характеристик процесса двухфотонного ТИ.

Полученные результаты могут быть использованы в астрофизике и физике атомных столкновений для изучения структуры сталкивающихся частиц и их взаимодействия, определения радиационных потерь, при диа-

гностике плазмы, а также в атомной спектроскопии. Результаты расчетов могут быть использованы как для объяснения уже имеющихся экспериментальных данных, так и при постановке новых экспериментов по изучению процессов однофотонного и двухфотонного ТИ.

Исследование локальности доплеровской рефлектометрии

Е. З. Гусаков, А. В. Сурков
ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Доплеровская флуктуационная рефлектометрия широко используется в настоящее время для изучения полоидального вращения плазмы токамака [1, 2]. При исследованиях этим методом в полоидальном сечении токамака наклонно по отношению к радиальному направлению вводится зондирующая волна, для которой в плазме имеется поверхность отсечки. Регистрируется сигнал, рассеянный назад и имеющий частоту отличную от зондирующей. Полагая, что такой сигнал сформировался в результате обратного рассеяния на флуктуациях плотности, или малоуглового рассеяния с последующим отражением от отсечки, по смещению частоты рассеянной волны можно получить информацию о скорости полоидального вращения плазмы. При этом обычно предполагается, что основной вклад в рассеянный сигнал вносит окрестность точки поворота, т.к. в этой области радиальная длина зондирующей волны возрастает вместе с ее амплитудой, что приводит к эффективному рассеянию на плазменной турбулентности, являющейся преимущественно длинноволновой.

В настоящей работе теоретически исследуется зависимость сигнала доплеровской рефлектометрии от положения турбулентности по отношению к отсечке. Вблизи отсечки рассмотрение проведено в предположении линейности профиля концентрации плазмы, а вдали от нее — для произвольного профиля в приближении геометрической оптики. Показано, что по мере удаления флуктуаций от отсечки сигнал рассеяния спадает обратно пропорционально квадрату радиального волнового вектора зондирующей волны. При этом для многих профилей плотности плазмы (например, для линейного) интеграл от эффективности рассеяния назад по радиальной координате будет расходиться за счет далеких от отсечки областей, что говорит об отсутствии сильной локализации рассеяния вблизи отсечки. Для малоуглового рассеяния в случае зондирования широким волновым пучком возникает дополнительная локализация вследствие приема сигнала рассеянного вдали от отсечки периферией диаграммы направленности антенны. В случае рассеяния назад дополнительная локализация может быть связана с убыванием спектров турбулентности по радиальным волновым векторам.

Список литературы

- [1] Буланин В. В., Лебедев С. В., Левин Л. С. и др. *Физика плазмы* **26**, 867 (2000).
- [2] Hirsch M., Holzhauser E., Baldzuhn J. et al. *Plasma Phys. Control. Fusion* **43**, 1641 (2001).

Циркулярный фотогальванический эффект в квантовых ямах

С. А. Тарасенко

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Показано, что поглощение циркулярно поляризованного света в структурах с квантовыми ямами приводит к возникновению электрического тока. Направление этого тока определяется поляризацией света и внутренними симметричными свойствами среды. В квантовых ямах, выращенных на основе полупроводников с решеткой цинковой обманки вдоль направления [001], циркулярный фототок возникает только при наклонном падении света. В низкосимметричных гетероструктурах эффект возможен и в геометрии нормального падения света.

Физически циркулярный фотогальванический эффект представляет собой преобразование вращательного момента фотонов в поступательное движение электронов и аналогичен классическому эффекту колеса или пропеллера.

В настоящей работе исследован циркулярный фотогальванический эффект в двумерном электронном газе при оптических переходах между подзонами размерного квантования. Микроскопически эффект обусловлен асимметричным фотовозбуждением носителей в системах с линейным по волновому вектору спиновым расщеплением электронных состояний. Показано, что правила отбора для оптических переходов вместе с законами сохранения энергии и импульса приводят к спектральной инверсии эффекта: с ростом частоты света фототок меняет направление на противоположное.

К вопросу о влиянии межфазного натяжения на термодинамическое равновесие между сульфидно-металлическими и силикатными расплавами

И. Г. Фокеева

ОАО «Институт Гипроникель», Санкт-Петербург

При плавке сульфидного медно-никелевого и окисленного никелевого сырья образуются две расслаивающиеся фазы: сульфидный (штейн) или металлический (ферроникель) расплав и окисдно-силикатный расплав (шлак).

Для указанных систем общепринято рассматривать распределение металлов: меди, никеля и кобальта между обеими фазами с позиций термодинамического равновесия, что, вероятно, вполне справедливо для реакций, протекающих при высоких температурах и, зачастую, в условиях интенсивного перемешивания фаз. Практический интерес представляет константа равновесия для указанных систем.

Исходя из того, что обе системы достигают термодинамического равновесия оценим различия в величинах констант с этих позиций. Изучим влияние на изменение термодинамического потенциала работы, возникающей под действием сил поверхностного натяжения.

Рассмотрим две изотропные фазы (две жидкости). Имея ввиду лишь термодинамические аспекты вопроса, будем считать, что одна из фаз (фаза 1) представляет собой шар, погруженный в другую фазу (фаза 2).

Исследуем для определенности систему, состоящую из двух фаз: металлический или сульфидный королек радиуса r (фаза 1) и силикатный расплав (фаза 2) между которыми находится переходный слой некоторой толщины. Рассматривая термодинамику этой системы, под королком мы будем подразумевать часть системы, заключенную внутри поверхности натяжения и состоящую из фазы 1 и соответствующего переходного слоя.

Для определения химического потенциала компонента в растворе обычно используют формулу вида:

$$\mu_i = \mu_i^{ct} + R \cdot T \cdot \ln a_i \quad (3)$$

где μ_i — активность i -ого компонента, μ_i^{ct} — химический потенциал компонента в стандартном состоянии. К малым частицам формула (1) практически неприменима, благодаря тому, что давление в частицах неодинакового размера и состава различно. Установлено, что при переходе от массивной фазы 1 к маленькой с учетом поверхностных эффектов константа равновесия будет определяться соотношением:

$$A_i \equiv \frac{a_{i1}}{a_{i2} a_{i2}^{ct}} = \exp \left(- \frac{2v_i \alpha + 3v_i \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j (\delta_{ij} - c_j)}{RT r} \right) \quad (4)$$

где α — значение межфазного натяжения для плоской поверхности, v_i — молярный объем i -ого компонента, a_{ij} — активность i компонента в фазе j ,

$$a_j^* = \frac{\partial \alpha}{\partial c_j}$$

c_j — концентрация j компонента в фазе 1; δ_{ij} — символ Кронекера.

Проекты МОЛОДЫХ КАНДИДАТОВ НАУК

Спиновые кинетические явления в полупроводниковых гетероструктурах

Л. Голуб

ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН

Циркулярный фото-гальванический эффект состоит в возникновении электрического тока, пропорционального степени циркулярной поляризации света. Анализируются различные двумерные системы, симметрия которых разрешает «циркулярный» фототок. Показывается, что эффект вызван спиновым расщеплением в нулевом магнитном поле, линейным по волновому вектору носителей. Изучается роль электронных и дырочных расщеплений при межзонном поглощении циркулярно-поляризованного света.

Исследование устойчивости линейно-поляризованных режимов генерации VCSELs

Т. Ю. Зернова, Ю. М. Голубев, А. А. Трусов

Научно-исследовательский институт Физики им. В. А. Фока СПбГУ

На основании спин-флип-теории построена квантовая статистическая теория одномодового виксела (VCSEL). Основные уравнения этой теории записаны как уравнения Гайзенберга–Ланжевена.

Уравнения квантово-статистической теории викселов построены с учетом линейного двулучепреломления полупроводникового кристалла и его линейного дихроизма. Заметим, что до сих пор модель излучения виксела строилась без учета линейного дихроизма полупроводника, т.к. его учет приводит к существенному усложнению теории. В то же время, реальный полупроводниковый кристалл обладает дихроизмом и учет этого свойства кристалла может оказаться важным.

Проведен вариационный анализ стационарных кинетических уравнений виксела, на основании которого определены области устойчивости линейно-поляризованных режимов генерации для широкого круга значений физических параметров таких, как параметры оптической анизотропии полупроводниковых кристаллов, спектральная модовая ширина, частотная отстройка генерации от центра контура усиления, релаксационных параметров полупроводниковой среды.

Детальный анализ областей устойчивости для x - и u -линейно поляризованных режимов генерации подтвердил уже известные результаты, полученные в предыдущих исследованиях условий стабильности линейно-поляризованных режимов генерации в вискселах. В то же самое время, поскольку мы не ограничивались только набором параметров, близких по значению к экспериментальным, мы смогли сделать более общие выводы. Важным результатом здесь следует считать выяснение роли линейного дихроизма, вносимого в систему полупроводниковым кристаллом. Даже очень малые значения дихроизма могут приводить к искажению границ устойчивости и к появлению принципиально новых областей неустойчивости. В целом предсказывается существенное расширение областей неустойчивости для одной поляризации и сужение для другой в присутствии линейного дихроизма кристалла.

Методы RAPD и SEMI-RAPD для молекулярного картирования генетических линий редиса (*Raphanus sativus* L.)

Т. В. Матвеева, Л. А. Лутова

Санкт-Петербургский государственный университет

Построение генетических карт является важной, проблемой как в фундаментальной генетике, так и в прикладных отраслях биологической науки. В последние годы список маркеров для картирования был заметно увеличен, благодаря привлечению молекулярных маркеров (ММ). ММ основанные на применении ПЦР являются одними из наиболее активно используемых в силу простоты и дешевизны метода. К ним относятся: RAPD и менее распространенным на данный момент метод semi-RAPD, основанный на использовании праймеров, содержащих консервативную и случайную части. Данная работа посвящена молекулярному маркированию линий редиса, контрастных по проявлению признака «опухолеобразование на корнеплоде», сравнению двух указанных выше методов по количеству генерируемых ими ММ и доле полиморфных маркеров среди них. В качестве материала использованы две инбредные линии редиса *Raphanus sativus* генетической коллекции Би НИИ СПбГУ, контрастные. по проявлению признака «опухолеобразование на корнеплоде» ПЦР проводили по стандартной методике. Для RAPD анализа использовано 10 случайных 10-членных праймеров и 10 двупраймерных комбинаций. Semi-RAPD анализ был проведен в двух вариантах: с использованием 12-ти и 15-ти членных праймеров. Для каждого варианта использовано по 10 праймеров и 10 двупраймерных комбинаций. Температура отжига праймеров составила 37 и 46 °С соответственно. По-

лучен 51 ММ линий редиса, которые можно использовать для характеристики других линий редиса и вовлечь в генетический анализ. Показано, что среднее количество ММ на ПЦР- реакцию не отличалось для всех вариантов 10 и 12 членных праймеров и составило 3,45 (из них 16% полиморфны). Для 15-членных праймеров оно было выше и составило 4,85 (из них 30% полиморфны). Таким образом, длинные полуслучайные праймеры показали себя наилучшим образом для молекулярного картирования.

Теоретическое и экспериментальное исследование высоко-градиентного многопучкового метода ускорения электронных сгустков

А. Д. Канарейкин, *И. Л. Шейнман*, А. М. Альтмарк

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

Новый метод кильватерного ускорения заряженных частиц, использующий кильватерные поля за проходящими через диэлектрическую волноведущую структуру электронными сгустками, в настоящее время является объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований [1–5]. Комплексное изучение кильватерного метода ускорения в диэлектрических волноводах проводится в СПбГЭТУ совместно с Аргоннской Национальной Лабораторией. Одним из распространённых типов диэлектрических волноводов [1] является однослойный волновод, представляющий собой диэлектрическую (как правило, керамическую) трубку с внутренним вакуумированным каналом для пролёта сгустков. Внешняя сторона диэлектрической трубки металлизируется. Кильватерное ускорение предполагает систему передачи энергии от сильноточного электронного сгустка к слаботочному сгустку высоких энергий. Сильноточные электронные сгустки малых энергий возбуждают в волноводной системе черенковскую электромагнитную волну с продольной компонентой электрического поля до 100 MV, которая используется для ускорения последующего слаботочного сгустка. Эффективность ускорения зависит от двух параметров: от величины энергии, переданной ведомому сгустку, характеризуемой ускорительным градиентом поля и от эффективности передачи энергии от ведущих сгустков к ведомому сгустку, характеризуемой величиной трансформационного коэффициента [2]. Для повышения этих параметров был предложен многопучковый метод ускорения, основанный на использовании цепочки сгустков драйверов. Однако между величиной трансформационного коэффициента и ускоряющим градиентом в ряде случаев существует обратное соотношение. Для нахождения оптимума был разработан новый критерий

эффективности, максимизирующий передаваемую ведомому сгустку энергию на заданной длине секции ускорителя. С другой стороны удовлетворение фазовым соотношениям (необходимость держать слаботочный сгусток в ускоряющей фазе волны) требует соблюдения жестких допусков на параметры волноведущей структуры и позиционирование сгустков. Изменение диэлектрической проницаемости волноведущей системы позволило бы в реальном времени регулировать фазовые соотношения волна-сгусток и обеспечить оптимальные энергетические условия для ускорения. Для решения этих проблем предложена управляемая ускорительная система с возможностью перестройки спектра частот излучения Вавилова-Черенкова в волноводе при помощи тонкого сегнетоэлектрического слоя, нанесенного на внешнюю сторону диэлектрического заполнения волновода [3]. Однако наряду с продольными полями, в кильватерных волноводах возбуждаются столь же значительные поперечные поля, которые приводят к отклонению пучка от оси волновода и попаданию частиц на стенки [4], тем самым, вызывая потери заряда сгустков и поверхностный электрический пробой материала диэлектрика. Особая продольная структура электродов, выбранная для управления диэлектрической постоянной сегнетоэлектрика, в сочетании с дополнительной поглощающей ферритовой оболочкой вокруг электродов позволяет обеспечить подавление поперечных отклоняющих мод при сохранении всех преимуществ возможности управления частотным спектром волновода [5]. Следует отметить, что возможность оперативной подстройки частоты волновода (а тем самым фазовой скорости ускоряющей волны) выгодно отличает структуры с керамическим заполнением от стандартных вакуумированных структур и открывает широкие возможности их использования в системах, требующих жесткой синхронизации «волна-пучок».

Список литературы

- [1] Kanareykin A. D., Sheinman I. L., Nenasheva E. A. et al., *Physics at the Turn of the 21st Century: Abstracts of the Intern. Conf.*, September 28–October 2, p. 57–58 1998.
- [2] J. G. Power, W. Gai, A. D. Kanareykin, *AIP Conference Proceedings* 569, New York, American Institute of Physics, p. 605–615, 2001.
- [3] Управление частотным спектром в кильватерных волноведущих структурах, *Письма в ЖТФ* Т. 28. Вып. 21. С. 75–81.(2002).
- [4] W. Gai, Kanareykin A. D., A. Kustov, J. Simpson, *Phys. Rev. E* 55, 3481–3488 (1997).
- [5] Альтмарк А. М., Канарейкин А. Д., Шейнман И. Л., *Письма в ЖТФ* Представлено к печати.

Содержание

Предисловие	3
Дипломные проекты	5
Теоретический анализ структурно-функциональных отношений субстратов холинэстераз <i>Д. А. Белинская, С. Г. Фалькович</i>	5
Применение экспериментальных и компьютерных методов для идентификации множественных тканеспецифических продуктов гена церулоплазмينا <i>А. В. Васин, С. А. Клотченко, Н. А. Платонова</i>	6
Обнаружение мутации и полиморфизма в гене миоцилина у больных глаукомой в Санкт-Петербурге <i>В. В. Егоров, В. В. Рахманов</i>	7
Механизм спиновой релаксации Дьяконова–Переля. Эффекты электрон-электронных столкновений <i>М. М. Глазов</i>	8
Когерентное обратное рассеяние света с конечной шириной спектра <i>Н. В. Ларионов</i>	9
Генерация и усиление антистоксового излучения при вынужденном комбинационном рассеянии в условиях фазового квазисинхронизма <i>Н. С. Макаров</i>	11
Статистическое исследование гамма-всплесков <i>А. В. Моисеев</i>	12
Динамика платинирования гистоновых белков <i>М. В. Новождёнова</i>	13
Нелинейные восприимчивости слабонеупорядоченного изинговского ферромагнетика в критической области <i>Д. В. Пахнин, А. И. Соколов, Б. Н. Шалаев</i>	14
Модификация метода приблизительного расчета площади поверхности макромолекулы, доступной растворителю <i>Г. Н. Рычков, М. Г. Петухов</i>	15
Анализ MAP-киназных каскадов трансформированных фибробластов грызунов после действия облучения и в условиях сывороточного голодания <i>И. А. Савельева, Т. В. Поспелова</i>	16

Теоретическое исследование жидкокристаллического упорядочения в полимерных щетках <i>М. Н. Чернявский</i>	18
Расчет пространственной корреляционной функции кулоновского кристалла <i>А. И. Чугунов</i>	19
Кандидатские проекты	21
Получение и исследование лазерной генерации в полупроводниковых структурах с фотонными кристаллами <i>Е. М. Аракчеева</i>	21
Вклад диаграмм двухфотонного обмена в энергию $(1s)^2 2p_{3/2}$ состояния литиеподобных многозарядных ионов <i>А. Н. Артемьев, В. А. Ерохин, М. М. Сысак, В. М. Шабаев, Т. Байер, Г. Зофф, Г. Плуниен</i>	22
Диэлектронная рекомбинация с использованием отрицательного континуума в тяжелых ионах <i>А. Н. Артемьев, В. А. Ерохин, А. Е. Класников, В. М. Шабаев, Т. Байер, К. Кожухаров, Т. Штолкер</i>	22
Процессы удаления нескольких электронов при взаимодействии ионов H^+ и He^{2+} из внешней оболочки атомов Ag и Xe <i>К. В. Кашиников</i>	23
Структурный фазовый переход в NbO_2 . Ренормгрупповой анализ в старших приближениях <i>К. Б. Варнаиёв</i>	24
Масс-спектрометрия летучих органических соединений с мембранным вводом пробы <i>О. С. Викторова</i>	26
Квантовоэлектродинамические поправки к энергии связи в негативном ионе Ека-радона ($Z=118$) <i>И. А. Гойденко, Л. Н. Лабзовский, Е. Eliav, U. Kaldor, P. Pyykkö</i>	27
Наблюдение отдельных локализованных состояний в твердых растворах $CdS_{(1-x)}Se_{(x)}$ <i>Н. Р. Григорьева, Б. В. Новиков</i>	28
Происхождение и эволюция Фундаментальной Плоскости для эллиптических галактик <i>Е. А. Евстигнеева</i>	29

Влияние электрических дрейфов на перенос примесей в пристеночной плазме токамака <i>Е. Г. Кавеева</i>	30
Особенности получения и конструирования асимметричных гибридных гетероструктур на основе соединений III–V и II–VI <i>В. Кайгородов</i>	31
Сверхизлучение Дике и промежуточная фаза при переходе от спонтанного излучения к вынужденному в полупроводниковых лазерах с квантоворазмерной активной областью <i>Л. Я. Карачинский</i>	32
Защита овощной продукции биопрепаратами <i>Е. И. Кипрушкина</i>	34
Динамический модуль и вязкость макромолекул дендримера <i>Д. А. Маркелов, Ю. Я. Готлиб</i>	35
Исследование электрических свойств 4H-SiC эпитаксиальных слоев облученных высокоэнергетичными тяжелыми ионами Kr^{+} <i>Г. А. Онушкин</i>	36
Киральные фазовые переходы: критическое поведение, контролируемое устойчивым фокусом <i>П. Калабрезе, Е. В. Орлов, П. Парруччини, А. И. Соколов</i>	37
Двумерная нелинейная теория корреляционной рефлектометрии <i>Е. З. Гусаков, А. Ю. Попов</i>	38
Исследование релаксации электронных возбуждений в люминофорах, легированных празеодимом <i>А. С. Потапов</i>	39
Магнитные квазищели в гетеропереходах III-го рода <i>К. С. Романов</i>	40
Моделирование электрических свойств поликристаллических керамических полупроводников <i>И. В. Рожанский</i>	41
Динамическая эволюция неиерархических кратных звездных систем. Тенденции, устойчивые к выбору начальных условий <i>А. В. Рубинов</i>	43
Позиционное клонирование районов хромосом, контролирующих количественные признаки у кур <i>А. А. Сазанов, В. А. Царева, А. Ф. Смирнов, Б. Вардецка, М. Корчак, К. Ящак, М. Н. Романов</i>	44

Перепутывание и сжатие в спиновых подсистемах многоатомных ансамблей	
<i>Д. В. Куприянов, И. М. Соколов, А. В. Славгородский</i>	45
Исследование процессов однофотонного и двухфотонного тормозного излучения при рассеянии релятивистских заряженных частиц на изолированных атомах и ионах	
<i>И. А. Соловьев</i>	46
Исследование локальности доплеровской рефлектометрии	
<i>Е. З. Гусаков, А. В. Сурков</i>	47
Циркулярный фотогальванический эффект в квантовых ямах	
<i>С. А. Тарасенко</i>	48
К вопросу о влиянии межфазного натяжения на термодинамическое равновесие между сульфидно-металлическими и силикатными расплавами	
<i>И. Г. Фокеева</i>	48
Проекты молодых кандидатов наук	51
Спиновые кинетические явления в полупроводниковых гетероструктурах	
<i>Л. Голуб</i>	51
Исследование устойчивости линейно-поляризованных режимов генерации VCSELs	
<i>Т. Ю. Зернова, Ю. М. Голубев, А. А. Трусов</i>	51
Методы RAPD и SEMI-RAPD для молекулярного картирования генетических линий редиса (<i>Raphanus sativus</i> L.)	
<i>Т. В. Матвеева, Л. А. Лутова</i>	52
Теоретическое и экспериментальное исследование высоко-градиентного многопучкового метода ускорения электронных пучков	
<i>А. Д. Канарейкин, И. Л. Шейнман, А. М. Альтмарк</i>	53

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии ПИЯФ РАН
188350, Гатчина Ленинградской обл., Орлова роща
Зак. ??, тир. 100, уч.-изд. л. 3.8, 25.03.2003 г.