

СОДЕРЖАНИЕ

Том 11, номер 5, 2020

БЕЗОПАСНОЕ ОБРАЩЕНИЕ С ЯДЕРНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ

Классификация радиоактивных отходов в РФ и США

Д. Д. Десятов, И. С. Батаков, Д. А. Терентьев, А. А. Екидин

251

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Моделирование теплофизических свойств и свойств переноса основных продуктов горения органических веществ

Ю. А. Богданова, С. А. Губин, Ж. А. Амир

260

Квантовомеханическая модель элементов нейронной сети

А. А. Новоселов, О. В. Павловский

266

Зарядовые свойства тория, имплантированного в оксид кремния

У. Н. Курельчук, П. В. Борисюк, А. В. Николаев, Е. В. Ткаля

271

УСКОРИТЕЛИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Тестовые пучки ускорительного комплекса ФИАН “ПАХРА”

*В. И. Алексеев, В. А. Басков, В. А. Дронов, А. И. Львов, И. А. Мамонов,
В. В. Полянский, С. С. Сидорин*

278

Вариант тракта транспортировки протонного пучка для онкоофтальмологического центра ПЛТ в НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ

С. А. Артамонов, Е. М. Иванов, Г. А. Рябов, В. А. Тонких, Д. А. Амерканов

284

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ, ПУЧКОВ ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Долгоживущие заряженные частицы в ультрапериферических столкновениях на LHC

Е. В. Жемчугов

289

Поиск скалярного резонанса в системе wf в пион-ядерном взаимодействии при импульсе 29 ГэВ/с

М. С. Холоденко от группы ВЕС

293

Contents

Vol. 11, No. 5, 2020

Safe Handling of Nuclear Materials

Radioactive Waste Classification in the Russian Federation and the USA

D. D. Desyatov, I. S. Batakov, D. A. Terentiev, and A. A. Ekin 251

Mathematical Modeling in Nuclear Technologies

Modeling of Thermophysical Properties and Transport Properties
of Basic Combustion Products of Organic Substances

Yu. A. Bogdanova, S. A. Gubin, and Zh. A. Amir 260

Quantum Mechanical Model of Neuron Network Elements

A. A. Novoselov and O. V. Pavlovsky 266

Charge Properties of Thorium Implanted in Silicon Oxide

U. N. Kurelchuk, P. V. Borisyuk, A. V. Nikolaev, and E. V. Tkalya 271

Charged Particle Accelerators for Nuclear Technologies

Test Beams of the LPI Accelerator Complex “Pakhra”

*V. I. Alekseev, V. A. Baskov, V. A. Dronov, A. I. L'vov, I. A. Mamonov,
V. V. Polyanskiy, and S. S. Sidorin* 278

Variant of the Protons Beam Delivery System for the Oncological Ophthalmological
Center of Proton Radiation Therapy at the NRC “Kurchatov Institute”—PNPI

*S. A. Artamonov, E. M. Ivanov, G. A. Riabov,
V. A. Tonkikh, and D. A. Amerkanov* 284

Interaction of Plasmas, Particle Beams, and Radiation with Matter

Long-lived Charged Particles in Ultraperipheral Collisions at the LHC

E. V. Zhemchugov 289

Search for a Scalar Resonance in the $\omega\phi$ System in the Collision of a 29 GeV/c
Pion Beam with a Nuclear Target

M. S. Kholodenko (On behalf of the VES Collaboration) 293

Подписано к печати 15.12.2021 г.

Формат 60 × 881/8

Усл. печ. л. 6.84

Тираж 50 экз.

Зак. 5142

Цена договорная

Учредитель: Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ” (НИЯУ МИФИ)

Исполнитель по госконтракту No. 4У-ЭА-201-18 ООО «ИКЦ «АКАДЕМКНИГА»,
117342 Москва, ул. Бутлерова, д. 17Б, а/я 47

Отпечатано в типографии «Book Jet» (ИП Коняхин А.В.),
390005, г. Рязань, ул. Пушкина, 18, тел. (4912) 466-151

БЕЗОПАСНОЕ ОБРАЩЕНИЕ С ЯДЕРНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ

УДК 608.2

КЛАССИФИКАЦИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ В РФ И США

© 2020 г. Д. Д. Десятов^а, *, И. С. Батаков^а, **, Д. А. Терентьев^а, ***, А. А. Екидин^б, ****

^аУральский федеральный университет (УрФУ), г. Екатеринбург, 620002 Россия

^бИнститут промышленной экологии УрО РАН, г. Екатеринбург, 620990 Россия

*E-mail: desyatovdenis1995@gmail.ru

**E-mail: batakov.ivan@yandex.ru

***E-mail: terentevdaniel@gmail.com

****E-mail: ekidin@mail.ru

Поступила в редакцию 12.10.2020 г.

После доработки 14.12.2020 г.

Принята к публикации 15.12.2020 г.

В работе рассмотрены подходы к системе классификации РАО в США и РФ. Показано многообразие источников образования радиоактивных отходов. Обоснована необходимость классификации и категоризации РАО. Обозначены основные проблемы в области обращения с РАО в двух странах, представлены пути развития двух систем по улучшению деятельности обращения с РАО. Показаны основные принципы оценки устойчивости в области управления радиоактивными отходами INPRO и снижения потенциально возможного облучения персонала и населения ALARA. Проведены сравнения двух национальных систем классификации РАО и выполнена оценка соответствия международным рекомендациям МАГАТЭ.

Ключевые слова: радиоактивные отходы, классификация, категоризация обращение, активность, состав

DOI: 10.1134/S2079562920040053

ВВЕДЕНИЕ

Развитие цивилизации непрерывно связано с развитием технологий. Численность населения, развитие экономики и культуры тесно связаны с тем, как используется, перерабатываются, утилизируются и выбрасываются природные и синтетические материалы и энергия. Современные технологии принесли огромные выгоды народам мира: увеличение продолжительности жизни, повышение мобильности, сокращение использования ручного труда, массовую урбанизацию, практически всеобщую грамотность. В частности, технологии на основе применения ядерных материалов или материалов, содержащих радиоактивные вещества, нельзя рассматривать только как физический артефакт, без присущих каждой технологии экономического, культурного, социального контекста, в рамках которых она развивается [1].

Во всех странах, осуществляющих деятельность по использованию ядерной энергии и источников ионизирующих излучений, во главе угла стоят вопросы обеспечения надлежащим образом защиты населения, персонала, собственности и окружающей среды. На каждом этапе жизненного цикла обращения с ядерными и радиоактивными материалами формируются различные по агрегатному со-

стоянию, радионуклидному составу, суммарной и удельной активности радиоактивные отходы. Система обращения с РАО, особенно на стадии финальной изоляции во многом определяет безопасность и общественную приемлемость радиационных и ядерных технологий. Важным структурным элементом системы обращения с РАО является классификация отходов, образующихся в многочисленных радиационных и ядерных технологиях.

Специфика деятельности объектов использования атомной энергии, способствует формированию единого мирового подхода к обеспечению радиационной и ядерной безопасности, эффективному регулированию деятельности по обращению с радиоактивными материалами, включая радиоактивные отходы. Несмотря на общие глобальные цели, историческое развитие радиационных и ядерных технологий на раннем этапе имеет длительный период монополии государств на обращение с радиоактивными и ядерными материалами. Существовавший в этот период режим секретности препятствовал международному сотрудничеству в этой области [2]. На этом этапе закладывались основы культуры безопасности, формировались элементы системы обращения с

источниками излучения. Режим секретности распространялся на сведения о сырье, технологиях и отходах. Это обстоятельство до сих пор определяет различие национальных подходов к набору системных элементов, а также взаимосвязями, установленными между этими элементами в структурах, описывающих системы обращения с РАО.

Разные экономические, социальные, культурные факторы определили формирование разных систем классификации РАО в разных странах. В каждой системе содержатся обоснованные элементы, обеспечивающие функционирование системы обращения с РАО так, чтобы минимизировать негативное воздействие в настоящем и обозримом будущем. Задача специалистов найти возможность интеграции лучших практик различных стран в области обращения с РАО для того, чтобы такая деятельность осуществлялась с максимальной экономической эффективностью при гарантированной безопасности персонала, населения и окружающей среды.

РОЛЬ И ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ РАО

В число ключевых институциональных и технологических вопросов обеспечения безопасности эксплуатации объектов использования атомной энергии входят риски, связанные с деятельностью по обращению с радиоактивными отходами. Радиоактивные отходы неизбежно образуются в ходе применения ядерных и радиоактивных материалов в научных исследованиях, промышленности или медицине. Деятельность по обращению с радиоактивными отходами на всех этапах жизненного цикла от образования до финальной изоляции, должна выполняться в условиях безопасности для персонала, населения и окружающей среды. Кроме того, согласно международно признанным требованиям INPRO, обращение с радиоактивными отходами от текущей деятельности не должно создавать чрезмерного бремени для будущих поколений. Для этого МАГАТЭ предлагает ряд мер [3]:

- минимизация текущего образования отходов (M1);
- применение системы классификации и категоризации радиоактивных отходов (M2);
- приведение к критериям приемлемости для захоронения всех отходов в пределах разумных временных рамках (M3);
- включение затрат на управление отходами в стоимость продукции или услуги технологий применения ядерных и радиоактивных материалов (M4).

Таким образом, классификация и категоризация радиоактивных отходов играет одну из ключевых ролей в обеспечении безопасности, как текущего обращения с РАО, так и служит интере-

сам будущих поколений. Адекватная система классификации и категоризации РАО необходима для систематизации обращения с отходами от любых видов деятельности и обеспечения эффективных коммуникаций между работниками, организациями и странами при обсуждении планов обращения с отходами.

Классификация РАО основывается на значениях активности и виде излучения радионуклидов в отходах. По величине активности МАГАТЭ определило шесть различных классов отходов [4]:

- освобожденные от контроля отходы (exempt waste EW);
- очень короткоживущие отходы (very short lived waste VSLW);
- очень низкоактивные отходы (very low level waste VLLW);
- низкоактивные отходы (low level waste LLW);
- среднеактивные отходы (intermediate level waste ILW);
- высокоактивные отходы (high level waste HLW).

Категорирование РАО проводится на основе сведений об их происхождении, и радиологических, физических, химических и биологических свойств. Категоризация отходов включает такие факторы, как место происхождения, физическое состояние (твердые вещества, жидкость, газ и т.д.), свойства (физические, химические и т.д.) и параметры процесса (предварительная обработка, обработка, кондиционирование, хранение и т.д.) отходов.

Система классификации и категоризации радиоактивных отходов обеспечивает связь между характеристиками отходов и требованиями к безопасности обращения с РАО на всех этапах жизненного цикла, особенно в отношении стадии финальной изоляции [3]. Такая система способствует оптимальному управлению различными типами РАО, сформированных на любых этапах ядерного-топливного цикла и любых технологий применения радиоактивных материалов. Систематизация данных должна охватывать все возможные источники, потоки отходов и типы обращения. Предполагается, что ко всем РАО в одной и той же категории и одного класса применяются одинаковые требования по обращению, включая финальную изоляцию. Класс и категория РАО определяют, возможные типы и способы финальной изоляции. Важной особенностью системы классификации отходов является точное определение границ между различными классами отходов.

Система классификации и категоризации, состоящая из системных элементов и их взаимосвязей, для эффективного функционирования требует управления ее жизненным циклом, включая

управление изменениями. Можно выделить два типа таких изменений:

- структурные изменения, которые осуществляются посредством внесения изменений в описание системы;
- функциональные изменения, которые осуществляются посредством изменения показателей функционирования.

Текущая практика обращения с отходами в различных странах отличается в подходах к формированию системы классификации и категоризации отходов. Каждая такая система имеет свои сильные и слабые стороны в контексте долгосрочной устойчивости. Знание и анализ эффективности существующих систем классификации и категоризации РАО являются ключом к планированию изменений, проведения целесообразных структурных или функциональных изменений.

ОСНОВНЫЕ ИСТОЧНИКИ (ТЕХНОЛОГИИ) ОБРАЗОВАНИЯ РАО

Побочным продуктом любой человеческой деятельности являются выбросы загрязняющих веществ в атмосферу, сбросы вредных веществ в водные объекты, отходы производства и потребления, наносящие вред окружающей среде. Развитие в XX веке технологий использования радиационных и ядерных материалов привело к образованию значительного количества специфического вида отходов производства — “радиоактивные отходы”. Радиоактивные отходы могут образовываться при генерации атомной энергии, при использовании радиоактивных материалов в медицине, сельском хозяйстве, пищевой промышленности, машиностроении, металлургии, горно-добывающей отрасли и многих других областях жизнедеятельности людей. На сегодняшний день по данным МАГАТЭ накопленные твердые радиоактивные отходы в мире составляют приблизительно 35 млн м³, из которых объем захороненных составляет примерно 81% [5]. Источники образования РАО многообразны и имеют характерные особенности в зависимости от производственных процессов и технологий применения ядерных и радиоактивных материалов.

1) Образование РАО в ядерной энергетике. На сегодняшний день предприятия атомной промышленности присутствуют в 30 странах, 11 стран продолжают строительство новых ЯЭУ, около 28 стран находятся на этапе планирования включения ядерной энергетики в национальную структуру энергопроизводства [6]. Источники образования РАО на предприятиях ядерно-топливного цикла (ЯТЦ) специфичны для каждого этапа обращения с радиоактивными и ядерными материалами, которые включают:

- добычу и обогащение урана;

- конверсия оксида урана в гексафторид урана и наоборот;
- изготовление топлива;
- штатная работа реактора;
- хранение отработанного топлива (в странах, где отработанное топливо является отходом);
- переработка и изготовление нового содержащего или смешанного оксида урана/плутония (MOX) (в странах, где данная используется данная технология).

На каждом этапе ЯТЦ известны физико-химические свойства РАО и основные радионуклиды, формирующие воздействие на окружающую среду и человека [3, 7]. На всех этапах, за исключением “работы реактора”, радионуклидный состав РАО соответствует составу исходных материалов. Штатная работа ядерных реакторов формирует сотни новых антропогенных элементов, несколько десятков из которых, представляют потенциальную опасность на стадии финальной изоляции РАО [8]. Количество и активность РАО специфична для каждого типа реакторных установок АЭС [9].

2) Образование РАО при эксплуатации исследовательских реакторов и ускорителей. В отличие от энергетических реакторов, направленных на генерацию электроэнергии, исследовательские реакторы имеют ряд применений: от обучения и подготовки кадров до калибровки и тестирования контрольно-измерительных приборов. На исследовательских реакторах происходит производство радиоизотопов, которые незаменимы в медицине. В настоящее время в 67 странах используется 252 исследовательских реактора. Область применения ускорителей заряженных частиц обусловлена такими технологическими процессами как: стерилизация медицинского оборудования и материалов, производство радиофармпрепаратов, изготовление элементов электроники, крупномасштабный мониторинг загрязнения воздуха и т.д.

Основными источниками образования РАО при эксплуатации исследовательских реакторов и ускорителей являются:

- отработанное ядерное топливо реакторов;
- облученные элементы;
- использованные, изношенные элементы конструкций установок;
- горюче-смазочные материалы.

3) Медицинская деятельность, продовольствие и сельское хозяйство. Радиационные технологии в медицине применяются для калибровки медицинского оборудования, диагностики и лечения онкологических заболеваний, а также при диагностике других заболеваний. К использованию радиационных технологий в сфере продовольствия относится обработка продуктов путем

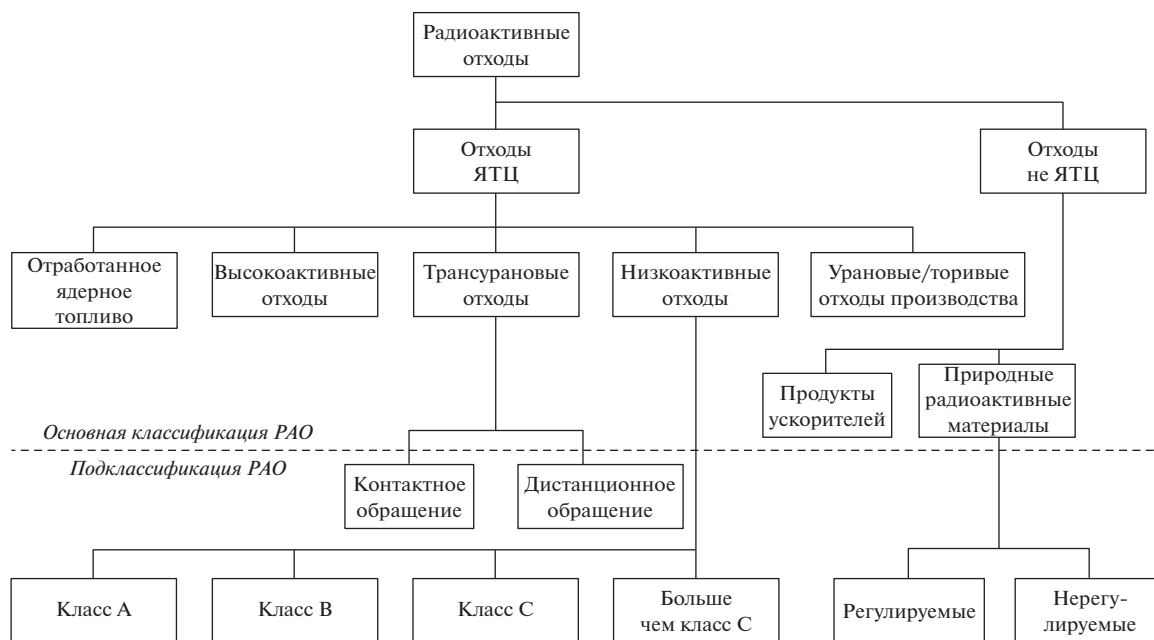


Рис. 1. Существующая система классификации РАО в США.

облучения ионизирующим излучением для повышения качества или продления срока годности, снижения риска распространения иных организмов внутри продукта и т.д. Очевидное преимущество перед химической обработкой – минимальное вредное воздействие на продукт. Использование ядерных технологий в сельском хозяйстве на данный момент также является очень актуальным решением проблем адаптации сельскохозяйственных культур. К источникам образования РАО в данной категории можно отнести:

- отработанные источники;
- генераторы и ядерные батарейки;
- рекультивация земель.

4) Ядерный оружейный комплекс. Радиоактивные отходы образуются в результате изготовления, испытаний ядерного оружия, также во время периодического обслуживания ядерных установок.

5) Вывод из эксплуатации ядерных установок, к которым относятся:

- энергетические реакторы;
- исследовательские реакторы;
- других установки топливного цикла;
- критические сборки;
- ускорительные и облучательные установки.

Обеспечить безопасное обращение с РАО при таком многообразии источников их образования возможно при адекватном регулировании такой деятельности со стороны государства [10, 11]. Ключевым элементом систематизации обращения с РАО является их классификация, позволяющая применять однотипные требования к каждому классу

и категории РАО, независимо от источника их образования. В каждой стране регулирование деятельности на каждом этапе обращения с РАО имеет свои особенности. Это связано с различными требованиями безопасности, требованиями к обращению, нормативной документацией, а также исторически сложившейся парадигмой развития ядерной отрасли в отдельно выбранной стране. Недостаткам национальных систем классификации РАО и отсутствие согласованности национальных систем вынуждают МАГАТЭ работать над ее совершенствованием. В основе классификации МАГАТЭ лежит учет вариантов окончательного захоронения РАО, а ее ключевыми признаками служат концентрация радионуклидов и период их полураспада [4]. В рамках данной статьи рассмотрены современные системы классификации РАО в двух странах, обладающих полными циклами обращения с радиоактивными и ядерными материалами РФ и США.

СРАВНЕНИЕ КЛАССИФИКАЦИИ ТРО РФ И США

Классификация ТРО в США

Классификация РАО в США опирается на потенциальный уровень радиационного воздействия (текущий или будущий) на человека, которое создает РАО [12]. В США выделяют две основные категории “отходы ЯТЦ” (Fuel-cycle waste) и “отходы, не связанные с ЯТЦ” (Non fuel-cycle waste (NARM)) [13]. Иллюстрация принятой в

США классификации РАО представлена на рисунке 1.

РАО, образовавшиеся на этапах ЯТЦ включают в себя отходы от: добычи природного урана, разделения и обогащения изотопов урана, изготовления ядерного топлива, переработки облученного топлива и последующего захоронения. Данная категория уже в зависимости от пути формирования РАО подразделяется на [13]:

- высокоактивные отходы (high-level waste – HLW). Высокоактивные отходы, радиоактивные материалы с высокой активностью или полученные в ходе переработки ОЯТ в жидком или твердом состоянии, содержащие продукты деления. Требуют постоянной изоляции [14];

- отработанное ядерное топливо (spent nuclear fuel – SNF). ОЯТ, которое содержит не перерабатываемые элемент [15], входит в состав HLW;

- трансурановые отходы (transuranic waste – TRU). РАО, не входящие в класс HLW, но содержащие материалы с загрязнением трансурановыми элементами (атомный номер превышает 92) концентрацией свыше 10 нКи/г или содержащие альфа-излучающие трансурановые элементы с периодом полураспада свыше 20 лет и с концентрацией свыше 100 нКи/г [14]. Трансурановые отходы подразделяются на два подкласса – трансурановые отходы, допускающие контактное обращение (contact-handled) и обрабатываемые дистанционным методом (remotely-handled). Главное их отличие состоит в мощности дозы, измеренной на поверхности контейнера с РАО. Если мощность дозы превышает 2 мЗв/ч, то данные РАО будут относиться к трансурановым отходам, обрабатываемым дистанционным методом; в обратном случае будут иметь место трансурановые отходы, допускающие контактное обращение;

- низкоактивные отходы (low-level waste – LLW). Характеризуются как РАО, чья удельная активность не позволяет отнести их к HLW, SNF, TRU или материалам определенных в секции 11e(2) Закона об Атомной энергии от 1954 года и классифицированные, как низкоактивные радиоактивные отходы (low level radioactive waste) [14]. Данный класс также включает в себя четыре подкласса РАО в зависимости от удельной активности радионуклида (A, B, C, GTCC) [16].

РАО, образовавшиеся вне ЯТЦ, обозначаются аббревиатурой NARM (Naturally Occurring Radioactive Materials (NORM) or Accelerator-Produced Radioactive Materials), т.е. могут быть рассмотрены как подкатегории: “природные радиоактивные материалы” или “продукты ускорителей”. Последняя подкатегория подразделяется на регулируемую и нерегулируемую. “Технологически усиленная” известна как TENORM [13] и представляет собой более широкую категорию, включающую радиоактивные отходы промышленных

процессов. Примерами этого могут служить отходы, образующиеся при добыче урана, бурения нефтяных и газовых скважин, а также летучая зола радиоактивного угля.

Классификация ТРО в РФ

Принятая в РФ классификация РАО является одной из наиболее полных и подробных в мире. Основными принципами классифицирования РАО в РФ принято считать физико-химические свойства радионуклида при его воздействии на организм человека с учетом уровня вмешательства. С учетом этого приняты предельные значения удельных и объемных активностей для отнесения отходов к РАО [17].

По УА ТРО, содержащие техногенные радионуклиды подразделяются на 4 категории: очень низкоактивные (ОНРАО), низкоактивные (НАО), среднеактивные (САО) и высокоактивные (ВАО); а жидкие радиоактивные отходы на три класса: низкоактивные (НАО), среднеактивные (САО) и высокоактивные (ВАО). В случае, когда по отдельным характеристикам радионуклидов, РАО относятся к разным категориям отходов, для них устанавливается наиболее высокое из полученных значений категории отходов (консервативный подход) [18]. Схематичная иллюстрация классификации РАО, принятой в РФ представлена на рисунке 2.

СХОДСТВА И РАЗЛИЧИЯ КЛАССИФИКАЦИИ РАО В РФ И США

Применяемые системы классификации РАО в РФ и США основываются схожих характеристиках отходов: значения удельной активности, радионуклидный состав, агрегатное состояние, физико-химические свойства, период полураспада и способах переработки.

В США классификация РАО учитывает источник происхождения отходов. После чего уже принимается решение по категорированию, способу переработки или захоронения РАО. Правовой контроль в сфере обращения РАО осуществляет государство в лице Atomic Energy Commission (AEC) и принимает регулирующие законы для РАО, Регулирующим органом, устанавливающий предельные значения концентрации по категориям для радионуклидов, является NRC [13]. Весь процесс обращения с РАО в США отдан коммерческим юридическим лицам, выполняющим работы по сбору, сортировке, перемещению, переработке, хранению и захоронению РАО при тщательном государственном надзоре и регулировании. В последние годы основной объем РАО категорий с низкими активностями подлежит переработке.

Для более удобного сравнения основных направлений в области обращения РАО была со-

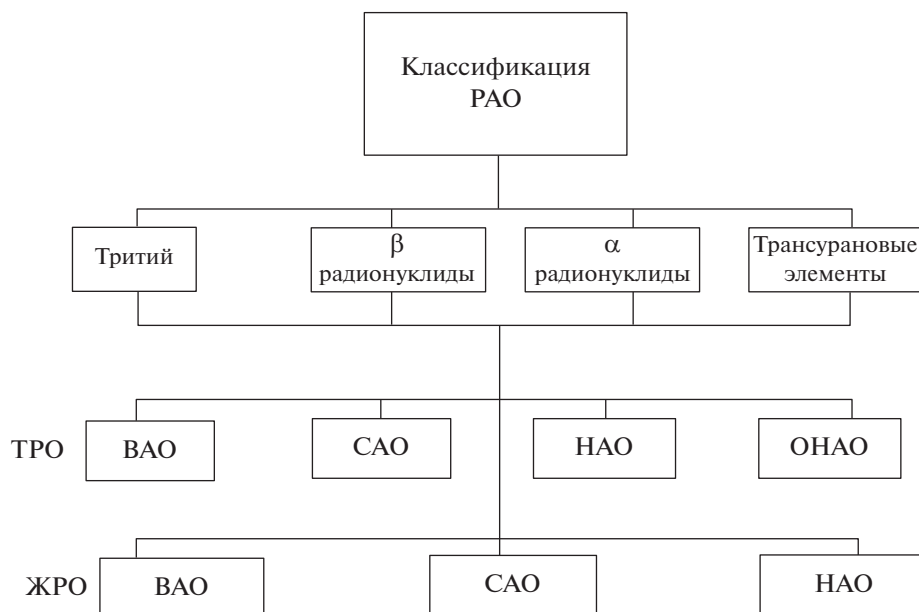


Рис. 2. Существующая система классификации РАО в РФ.

ставлена табл. 1. В данной таблице изложены ключевые моменты в существующих классификациях РАО и дано сравнение с показателями, рекомендованными международной комиссией по атомной энергии МАГАТЭ [4].

Существующая в РФ система классификации РАО во многом пересекается с теми требованиями, что устанавливает МАГАТЭ, тогда как принятая в США система классификации РАО имеет в своей основе уникальные принципы отнесения ядерных материалов к РАО и в некоторых моментах сильно отличается от международной практики, особенно в области ОЯТ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Необходимость обеспечения однозначной сегрегации для обработки, хранения, удаления и идентификации возникающих отходов решается путем разработки эффективной схемы классификации отходов на основе концентраций радиоактивности и видов, а также схемы категоризации отходов на основе происхождения, типа, свойств и т.д. Важной особенностью эффективной и действенной системы обращения с отходами является наличие адекватной национальной системы классификации и категоризации для обработки радиоактивных отходов. При планировании изменений системы классификации и категоризации РАО целесообразно учитывать глобальный опыт, полученные знания о существующих в мире практик обращения с РАО. Методологии ИНПРО для оценки устойчивости в области управления отходами требуют адекватной класси-

фикации отходов для облегчения обращения с отходами. Концепция системы классификации отходов позволяет идентифицировать отходы с достаточно низкими концентрациями активности, чтобы их можно было утилизировать в приповерхностных установках для захоронения, или отходы, которые необходимо утилизировать в установках для геологического захоронения с более надежными функциями локализации и изоляции. Кроме того, классификация является хорошим инструментом, позволяющим идентифицировать отходы, которые могут быть удалены из-под контроля с точки зрения радиационной безопасности.

В данной статье были рассмотрены два основных примера классификации и категоризации в рамках деятельности по обращению с РАО, которые независимо формировались на всем протяжении пути становления атомной отрасли в мире и включили в себя особенности социально-политической жизни государств. Вследствие исторически сложившихся монополий на обращения с радиоактивными материалами и отсутствия международного сотрудничества между государствами, в США и РФ были выбраны принципиально разные подходы к обращению с РАО, в том числе и к системе их классификаций. Система, действующая в США на данный момент, больше согласуется с базовым принципом ИНПРО, так как механизм переработки РАО в этой стране налажен сильнее. Но подход, использующийся в России, подразумевает более перспективные методы переработки и использование ядерной энергии за счет повторного использования топлива в реакторных установках на быстрых нейтронах (БН).

Таблица 1. Сравнение основных ключевых показателей классификации РАО ТРО

Критерий	РФ	США	Рекомендации МАГАТЭ
Главный критерий классификации	Превышение уровня вмешательства, способ переработки	Путь образования, степень риска воздействия	Степень риска воздействия
Регулирующий орган	Правительство РФ	AEC NRC EPA	Совместно с: IAEA, EC, OECD/NEA
ОЯТ	Не считается РАО	Считается РАО	Рекомендуется перерабатывать (не считается РАО)
Классы	ВАО САО НАО ОНРАО ОНАО	SNF HLW TRU LLW (Class A, B, C, GTCC)	ВАО (HLW) САО (ILW) НАО (LLW) ОНРАО (VLLW) ОКЖО (VSLW)
Короткоживущие/долгоживущие радионуклиды (период полураспада)	15 суток при сортировке 31 год в процессе присвоения кода РАО	100 лет	30.2 года
Нормативные документы	ФЗ-190 ФЗ-170 ПП № 1069	NRC DOE	Международные конвенции
Категория “освобожденные от контроля отходы”	Есть, ОНАО чья удельная активность ниже предельных значений	Отсутствует	Категория ОНАО (EW)
Операторы РАО	НО РАО, государственный монополист в сфере захоронения РАО	Операторами РАО являются частные компании, эксплуатирующие АЭС при государственном регулировании MDO – Организация по обращению и захоронению РАО*	Частные компании при государственном регулировании
Способы обращения с РАО	Захоронение Хранение Переработка	Захоронение Хранение Переработка	Захоронение Хранение Переработка
Трансурановые хвосты (обедненный уран, ториевые материалы)	Не является отходами, материал будущего	Является отходами	Является отходами
Отходы из других стран	Запрещен экспорт РАО, допускается завоз ядерных материалов с целью переработки	Запрещено	Разрешает экспорт РАО

* Создание такой организации предусмотрено положениями Стратегии по обращению и захоронению ОЯТ и ВАО, утвержденной Правительством США, однако до сих пор Конгресс не рассмотрел вопрос о внесении соответствующих поправок в национальное законодательство.

Если рассматривать предложенные МАГАТЭ меры, описанные в разделе “роль и задача классификации РАО”, в отдельности, то каждая страна имеет преимущество в отдельно взятом пункте. По первому признаку (М1) имеет преимущество РФ, так как есть множество подкатегорий в классификации и все ядерные материалы разделены по влиянию на организм (в зависимости от периода полураспада и вида излучения). По второму признаку (М2) – паритет. Ядерные материалы контролируются на всех этапах. По третьему признаку (М3) преимущество у США, так как переработка происходит на АЭС, а все что не перерабатывается, отправляется на места на места захоронения, в отличие от РФ, где долговременно хранят не переработанные отходы на АЭС. По 4-му признаку (М4) лучшая практика наблюдается в США, так как данная система управления РАО изначально создавалась в коммерческих условиях.

Однако, на сегодняшний день, ни одна из существующих систем классификации и способов обращения с РАО двух государств не может в полной степени удовлетворить всем нуждам атомной промышленности и требует улучшений. Так РФ основной упор дальнейшего развития направлен на создание перерабатывающих предприятий для снижения объемов поступающих низкоактивных РАО, а также на создание новых мест долговременного хранения высокоактивных и среднеактивных РАО, ввиду ограниченности вместимости существующих мест хранения. С другой стороны, в США уже существуют предприятия по переработке РАО, однако данные работы производят частные компании, деятельность которых контролируется государством. Основными направлениями развития в данном вопросе выделяют:

– реформирование системы классификации РАО (приведение существующей системы к общепринятым стандартам МАГАТЭ);

– создание единого национального оператора по обращению с РАО (для снижения рисков по потере контроля над радиоактивными веществами и снижения затрат на контролируемую деятельность со стороны государства).

Поскольку не существует единой системы классификации РАО, рассмотренные государства идут по своему пути в этой области, но к единой цели – обеспечение безопасности населения, персонала и окружающей среды, следуя принципам оценки устойчивости в области обращения с отходами INPRO – управление радиоактивными отходами в ядерной энергетической системе осуществляется таким образом, что оно не будет налагать чрезмерное бремя на будущее поколение. Дополнительно стоит отметить, что любые изменения, проводимые в рамках совершенствования системы классификации, непременно должны основываться на минимизации потенциального нега-

тивного воздействия РАО на окружающую среду, персонала и населения (принцип ALARA).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Lawson H.B.* A Journey Through the Systems Landscape. 2010. London: College Publ.
2. *Novikov G.A., Tashlykov O.L., Scheklein S.E.* Ensuring Safety in the Field of Atomic Energy Use, The School-Book. 2017. Yekaterinburg: YuUrGU (in Russian).
3. IAEA-TECDOC-1901. 2020. Vienna: IAEA.
4. Classification of Radioactive Waste. General Safety Guide No. GSG-1. 2009. Vienna: IAEA.
5. Nuclear Energy Series No. NW-T-1.14. 2018. Vienna: IAEA.
6. World Nuclear Industry Status Report 2019. A Mycle Schneider Consulting Project, Paris, Budapest, September 2019.
<https://www.worldnuclearreport.org/-World-Nuclear-Industry-Status-Report-2019.html>
7. IAEA Nuclear Energy Series. No. NG-T-3.15. 2016. Vienna: IAEA.
8. *Vasiliev A.V., Ekinin A.A., Yusupov R.I., Pudovkin A.V.* // Zh. Appar. Nov. Radiat. Izmer. 2017. V. 91. No. 4. P. 23–30.
9. *Ekinin A.A., Antonov K.L.* // Radioakt. Otkhody. 2020. V. 11. No. 2. P. 66–74.
10. Federal Safety Regulations in the Field of Atomic Energy Use. Safety in Radioactive Waste Management. General Provisions. NP-058-14. No. 347. 2014.
11. Federal Law of the Russian Federation No. 190-FZ of 11.07.2011, as amended by the Federal Law No. 188-FZ of 02.07.2013.
12. *Croff A.G. et al.* National Council on Radiation Protection and Measurements Report. No. 139. 2002.
13. *Djokić D.* A Characteristics Based Approach to Radioactive Waste Classification in Advanced Nuclear Fuel Cycles. PhD Dissertation. 2013. Berkeley: University of California.
14. The Nuclear Waste Policy Act of 1982. 2004. Washington, D.C.: U.S. Department of Energy Office of Civilian Radioactive Waste Management.
15. Nuclear Regulatory Commission. Part 60 – Disposal of High-Level Radioactive Wastes in Geologic Repositories. U.S. Code of Federal Regulations. 2002.
16. Nuclear Regulatory Commission, “Licensing Requirements for Land Disposal of Radioactive Waste – Waste Classification.” Title 10, Part 61.55 of the U.S. Code of Federal Regulations. 2002.
17. Decree of the Government of the Russian Federation No. 1069 of 19.10.2012, as amended by the Decree of the Government of the Russian Federation No. 95 of 04.02.2015.
18. Sanitary Rules and Standards of the Joint Venture 2.6.1.2612-10. Basic Sanitary Rules for Ensuring Radiation Safety (OSPORB-99/2010). No. 40. 2010.

Radioactive Waste Classification in the Russian Federation and the USA**D. D. Desyatov^{1, *}, I. S. Batakov^{1, **}, D. A. Terentiev^{1, ***}, and A. A. Ekinin^{2, ****}**¹ *Ural Federal University, Yekaterinburg, 620002 Russia*² *Institute of Industrial Ecology, Yekaterinburg, 620990 Russia***e-mail: desyatovdenis1995@gmail.ru****e-mail: batakov.ivan@yandex.ru*****e-mail: terentevdaniel@gmail.com******e-mail: ekinin@mail.ru*

Received October 12, 2020; revised December 14, 2020; accepted December 15, 2020

Abstract—Approaches to the system of radioactive waste classification in the USA and the Russian Federation were considered. The variety of sources of radioactive waste generation is shown. The necessity of radioactive waste classification and characterization is justified. The main problems in the field of radioactive waste management in two countries are outlined, the ways of development of two systems to improve the activity of radioactive waste management are presented. The basic principles of assessing the sustainability in the field of radioactive waste management INPRO and reducing the potential exposure of personnel and population of ALARA are shown. Comparisons of two national systems of radioactive waste classification were made and compliance with the IAEA recommendations was assessed.

Keywords: radioactive waste, classification, characterization, handling, activity, composition

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 536.71,536.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ОСНОВНЫХ ПРОДУКТОВ ГОРЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

© 2020 г. Ю. А. Богданова^а *, С. А. Губин^а, Ж. А. Амир^б

^аНациональный исследовательский ядерный университет МИФИ, Каширское ш. 31, Москва, 115409 Россия

^бКазахский национальный университет им. Аль-Фараби, Алматы, 050040 Казахстан

*E-mail: bogdanova.youlia@bk.ru

Поступила в редакцию 12.07.2020 г.

После доработки 02.08.2020 г.

Принята к публикации 05.08.2020 г.

С использованием уравнения состояния на основе теории возмущений рассчитаны теплофизические свойства основных продуктов горения органических веществ N_2 , O_2 , CO_2 , H_2 при нормальных условиях и в области повышенных давлений. Проанализирована методика расчета вязкости индивидуальных веществ на основе уравнения Чепмена–Энскога с использованием значений радиальной функции распределения.

Ключевые слова: продукты горения, флюид, радиальная функция распределения, теория возмущений, уравнение состояния, свойства переноса

DOI: 10.1134/S207956292004003X

ВВЕДЕНИЕ

Исследование свойств продуктов горения органических веществ до сих пор является актуальной задачей. Например, на площадке атомных электростанций (АЭС) оборудованы пускорезервные котельные, которые обеспечивают паровой нагрузкой АЭС в период строительства, пуска, ремонта и в случае ее аварийного отключения. Использование котлов, работающих на природном газе, является экономически более эффективным, чем работа электрических котельных. Поэтому изучение свойств продуктов горения органических топлив является актуальной задачей. Проведение реальных экспериментов не всегда возможно, сопряжено со значительными трудностями, в том числе по требованиям безопасности. Поэтому реалистичное термодинамическое моделирование представляет значительный интерес.

В настоящее время для термодинамического моделирования применяются как эмпирические, так и теоретические уравнения состояния. Однако в последнее время разработка теоретически обоснованных уравнений состояния (УРС) плотных флюидных систем на базе современных методов статистической механики и реалистичных потенциалов взаимодействия молекул привлекает внимание многих исследователей возможностью достоверного прогнозирования теплофизических свойств веществ (или продуктов горения)

в широкой области давлений и температур. Такие УРС обеспечивают хорошее согласие с результатами моделирования Монте-Карло (МК) и молекулярной динамики (МД), и их можно использовать для прогнозирования свойств флюидных систем в широкой области давлений и температур.

Одной из лучших теорий, позволяющих получать УРС флюидов как при высоких давлениях и температурах, так и при более низких температурах и плотностях, является теория возмущений KLR [1, 2]. Теория возмущений применима к любым газообразным или конденсированным системам, в которых имеются взаимодействия, описываемые межатомным потенциалом. Основная идея любой теории возмущений состоит в разделении потенциала $\phi(r)$ исследуемой системы (т.е. системы, для которой необходимо вычислить избыточные, по сравнению с идеальным газом, термодинамические свойства) на две составляющие: доминирующую часть, представляющую собой потенциал взаимодействия молекул в некоторой базисной системе, и малое возмущение. В качестве базисной используется система твердых сфер, которая обычно применяется для исследований плотных флюидов.

В настоящей работе уравнение состояния [2] на основе теории возмущений используется для расчета термодинамических свойств основных продуктов горения N_2 , O_2 , CO_2 , H_2 органических

Таблица 1. Потенциальные параметры молекул исследуемых веществ

Молекула	ε/k_B , К	r_m , А	α
H ₂	36.9	3.67	10.6
N ₂	100.6	4.25	12.3
O ₂	96.2	3.79	14.7
CO ₂	230.2	4.22	13.8

веществ как при нормальных условиях, так и в области повышенных давлений. Для расчета вязкости веществ протестирована методика, использующая значения радиальной функции распределения и диаметра твердых сфер, которые рассчитываются с помощью разработанной авторами методики [3].

ПОТЕНЦИАЛ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Во взаимодействиях молекул и атомов в области повышенных давлений и температур, характерных для ударных волн и детонации, важную роль играют силы отталкивания. Поэтому в области экстремальных плотностей энергии для описания межмолекулярного взаимодействия компонентов флюидной смеси обосновано применение потенциала Букингема Exp-6:

$$\varphi(r) = \frac{\varepsilon}{\alpha - 6} \left(6 \cdot \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_m} \right) \right] - \alpha \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right), \quad r \geq c, \quad (1)$$

$$\varphi(r) = +\infty, \quad r \leq c,$$

где r – расстояние между центрами частиц, ε – глубина потенциальной ямы, r_m – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю, c – положение физически необоснованного максимума потенциала ($c < r_m$, $\varphi'(c) = 0$, $\varphi''(c) < 0$). Параметры межчастичного потенциала r_m и ε являются характеристиками соответствующего вещества. Минимум потенциала лежит в точке $r_{\min} = 2^{1/6} r_m$. При расстоянии между центрами частиц меньшем, чем $r_{\min}$, силы отталкивания преобладают над силами притяжения.

Параметры потенциала Exp-6 (1) для описания взаимодействий между молекулами исследуемых веществ в настоящей работе были определены в [4] и представлены в табл. 1.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ ВЯЗКОСТИ

Расчет теплофизических свойств продуктов горения N₂, O₂, H₂, CO₂ проводился с использованием теоретически обоснованного УРС [2], полученного на основе теории возмущений. Для этого

была решена термодинамическая Tr -задача (изотермическое сжатие до заданного давления). Для атмосферного давления температура задавалась в диапазоне от 200 до 2500 К. Область повышенных давлений 1 бар $< p < 1000$ бар включала температуры от 270 до 1300 К.

Теория вязкости плотных газов была предложена Энскогом [5], в которой предполагается, что передача количества движения в газе от слоя к слою осуществляется не только молекулами, центры которых проходят через разделяющую эти слои плоскость, но и молекулами, центры которых при столкновении находятся по обе стороны воображаемой плоскости раздела.

Анализ имеющихся в литературе [5–9] аналитических зависимостей для расчета вязкости в широком диапазоне изменения давления и температуры показал, что наиболее достоверные результаты как при нормальных условиях, так и в области повышенных давлений дает выражение [7]:

$$\eta = \frac{\eta_B}{g(T, P)} \left(1 + \frac{4}{15} \pi \rho d^3 g(T, P) \right)^2 + \frac{3}{5} \zeta(\rho, T), \quad (2)$$

где $\eta_B = 1.0160 \cdot \frac{5}{16d^2} \cdot \sqrt{\frac{m}{\pi k_B T}}$ – вязкость, полученная из уравнения Больцмана для твердых сфер [6], m – масса частицы, k_B – постоянная Больцмана, $g(T, p)$ – функция распределения твердых сфер в точке контакта, ρ – плотность, d – диаметр твердых сфер.

Второе слагаемое в (2) при атмосферном давлении пренебрежимо мало и вносит существенный вклад лишь в области повышенных давлений:

$$\zeta(\rho, T) = \frac{4}{9} \rho^2 d^4 g(T, P) (\pi m k_B T)^2, \quad (3)$$

где m – масса частицы, k_B – постоянная Больцмана, $g(T, p)$ – функция распределения твердых сфер в точке контакта, ρ – плотность, T – температура, d – диаметр твердых сфер.

Входящие в выражения (2)–(3) значения функции распределения $g(T, p)$ и диаметра d твердых сфер определяются согласно методике [3], которая является неотъемлемой частью модели УРС [2] на основе термодинамической теории возмущений.

На рис. 1а–1г представлены результаты термодинамического моделирования веществ N₂ (а), O₂ (б), H₂ (в), CO₂ (г) в виде зависимости температуры от плотности веществ при атмосферном давлении в сравнении со справочными данными [10, 12]. Как видно из рис. 1а–1г, УРС [2] отлично описывает состояние продуктов горения при атмосферном давлении в рассматриваемом диапазоне температур 200–2500 К.

Рисунок 2 показывает зависимость вязкости веществ, рассчитанных по формуле (4), от температуры при нормальном давлении 1 бар. На ри-

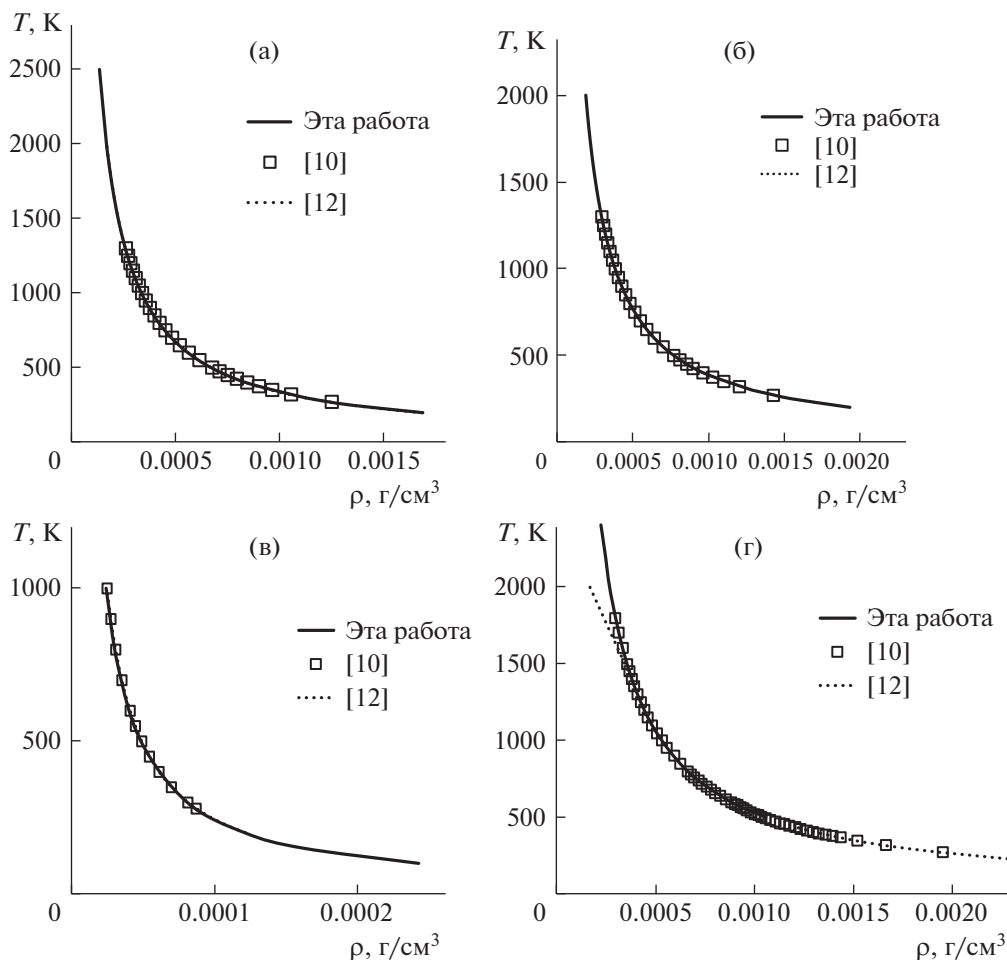


Рис. 1. Зависимости температуры от плотности веществ при атмосферном давлении: (а) N_2 , (б) O_2 , (в) H_2 , (г) CO_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10].

сунке также представлены справочные данные [10–12]. При детальном рассмотрении рис. 2 можно заметить, что для CO_2 согласие расчетов вязкости (рис. 2г) со справочными данными несколько хуже, чем для других веществ N_2 , O_2 , H_2 (рис. 2а–2в). Анализ статистики отклонений расчетных от справочных данных показал, что средняя относительная погрешность расчета для веществ N_2 , O_2 , H_2 , состоящих из двухатомных молекул, не превышает 6%, в то время как для CO_2 — в пределах 10%.

На рис. 3–6 представлены изотермы каждого вещества в виде p – ρ зависимости (а) и зависимость вязкости от давления на изотермах (б) в сравнении со справочными данными [10, 12]. Как видно из рис. 3–5а УРС [2] позволяет в хорошем согласии со справочными данными описать состояние веществ в широком диапазоне давлений и температур. Для веществ, состоящих из двухатомных молекул, N_2 , O_2 , H_2 среднее значение отклонений расчетных значений вязкости от спра-

вочных данных увеличивается с ростом молекулярной массы, но в целом не превышает 5%.

Для диоксида углерода наблюдаются более значительные отклонения расчетных величин вязкости от справочных данных с ростом давления и снижением температуры (рис. 6б), которые могут быть обусловлены большим молекулярным весом по сравнению с другими рассмотренными веществами. Можно предположить, что аналитическая зависимость, предложенная в [5], не подходит для расчета вязкости веществ, состоящих из тяжелых молекул, и требует модификации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе продемонстрирована применимость разработанного теоретически обоснованного УРС [2] с использованием межчастичного потенциала Букингема Exp-6 для термодинамического моделирования свойств основных продуктов горения в согласии со справочными данными, как при нор-

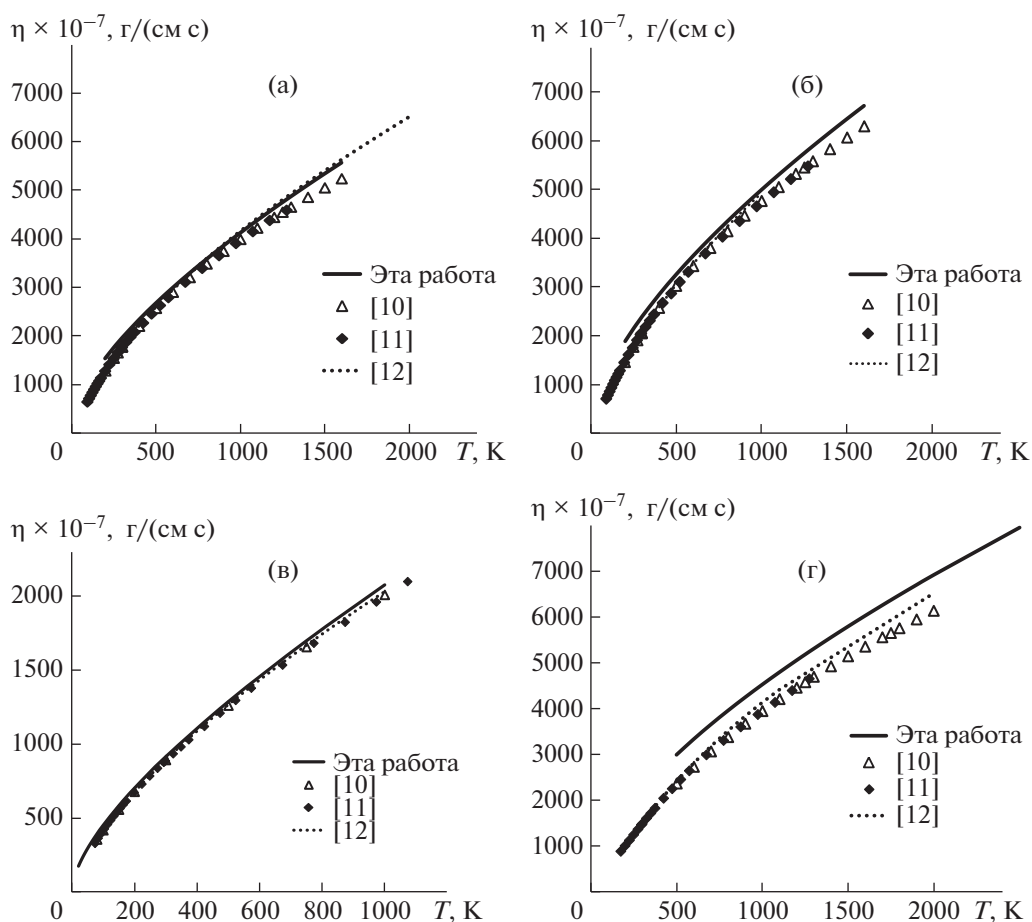


Рис. 2. Зависимости вязкости веществ от температуры при атмосферном давлении: (а) N_2 , (б) O_2 , (в) H_2 , (г) CO_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10] и Голубева [11].

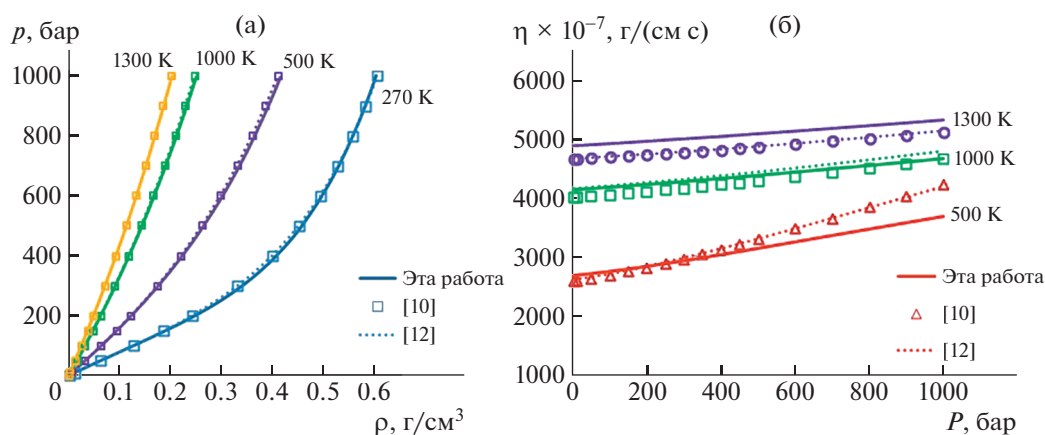


Рис. 3. Зависимость давления от плотности (а) и вязкости от давления (б) на изотермах для азота N_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10].

мальных условиях, так и в области повышенных давлений и температур. Рассчитываемые в рамках теории возмущений и УРС [2] значения радиаль-

ной функции распределения и диаметра твердых сфер позволили найти аналитическое выражение для расчета коэффициента вязкости веществ в хо-

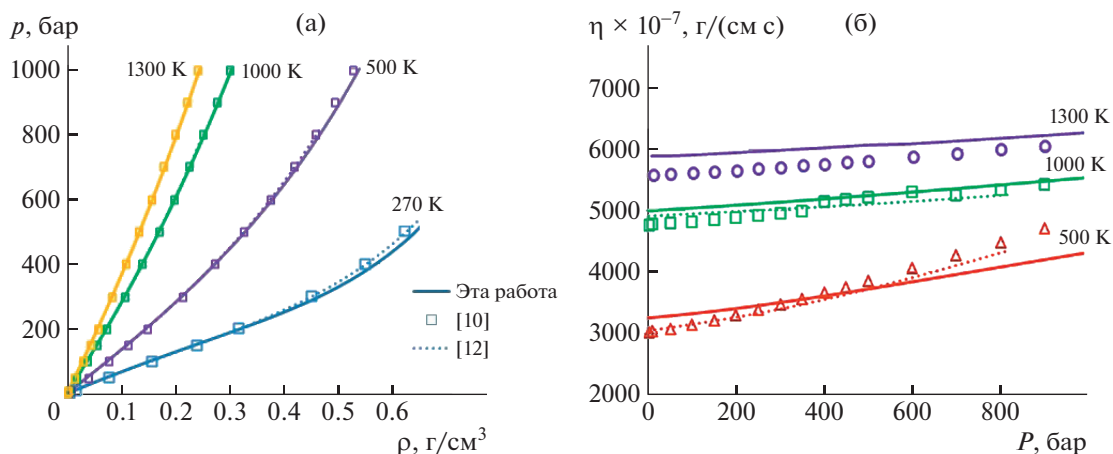


Рис. 4. Зависимость давления от плотности (а) и вязкости от давления (б) на изотермах для кислорода O_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10].

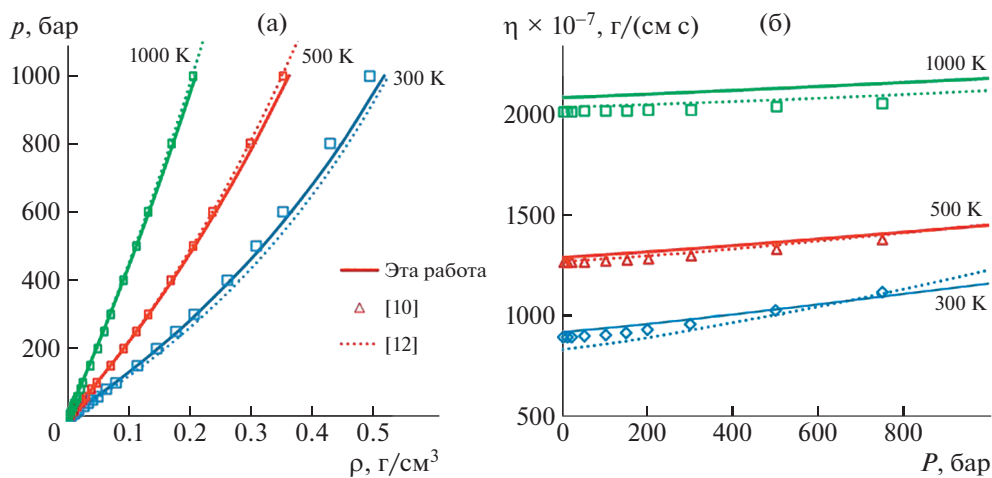


Рис. 5. Зависимость давления от плотности (а) и вязкости от давления (б) на изотермах для водорода H_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10].

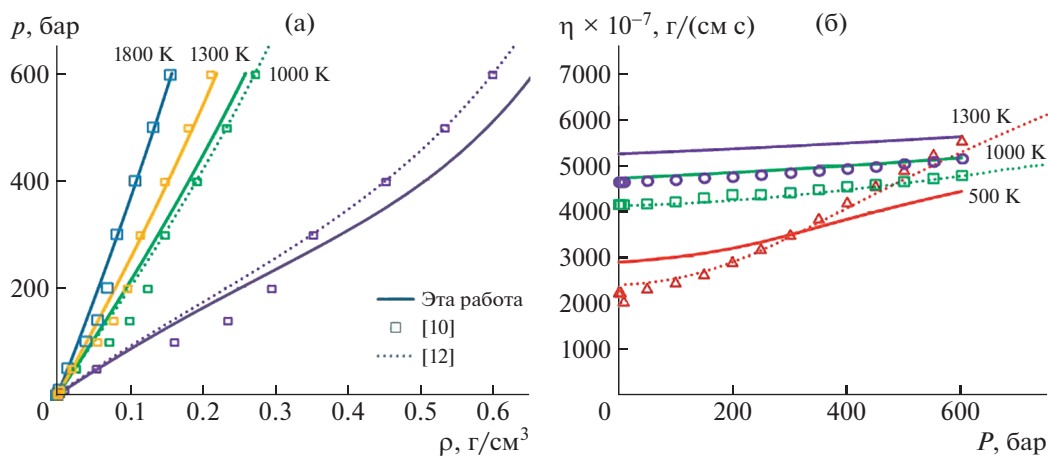


Рис. 6. Зависимость давления от плотности (а) и вязкости от давления (б) на изотермах для диоксида углерода CO_2 . Сплошные линии — результаты настоящей работы, пунктирные линии — данные [12], символы — справочные данные Варгафтика [10].

рошем согласии со справочными данными в рассмотренной области давлений и температур.

В тоже время показано, что с увеличением глубины потенциальной ямы ϵ/k_B и молярной массы веществ возрастает отклонение расчетной величины вязкости вещества от справочных данных с ростом давления и уменьшением температуры. Поэтому необходима модификация аналитической зависимости вязкости с учетом величин ϵ/k_B и молярной массы молекул исследуемых веществ.

В следующих работах на основе полученных результатов будет проведен анализ смесевых правил для расчета свойств переноса смесей, образующихся в результате горения органических веществ.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была поддержана Российским научным фондом по проекту № 16-11-10195.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H. // J. Chem. Phys. 1985. V. 82. No. 1. P. 414.
2. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Victorov S.B., Gubina T.V. // High Temp. 2015. V. 53. No. 4. P. 481.
3. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. // Phys. At. Nucl. 2019. V. 82. No. 11. P. 1486; Yad. Fiz. Inzhin. 2019. V. 10. P. 285 (in Russian).
4. Fried L.E., Howard M., Souers P.C. // Proc. 12th Int. Detonation Symp., Arlington, VA, San Diego, California CA, USA, Aug. 11–16, 2002. Ed. Short J. P. 564.
5. Enskog D. // Kgl. Svenska Vetenskapsakad. Handl. 1922. V. 63. P. 1.
6. Chapman S., Cowling T.G. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. 1970. Cambridge: Cambridge Univ. Press.
7. Montanero J.M., Santos A. // Phys. Rev. E. 1996. V. 54. P. 438.
8. Marques Jr. W., Kremer G.M. // Rev. Bras. Fís. 1991. V. 21. P. 402.
9. Protapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. // Chem. Phys. 1975. V. 8. P. 17.
10. Vargaftik N.B. Spravochnik po teplofizicheskim svoystvam gazov i zhidkostey. [Handbook of the Thermophysical Properties of Gases and Liquids]. 1972. Moscow: Nauka (in Russian).
11. Golubev I.F. Vyazkost' gazov i gazovykh smesey. Spravochnik. [Viscosity of Gases and Gas Mixtures. A Handbook]. 1959. Moscow: GIFML (in Russian).
12. Linstrom P.J., Mallard W.G. Eds., NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database. No. 69. 2020. Gaithersburg, MD, USA: Natl. Inst. Standards Technol. <https://doi.org/10.18434/T4D303>

Modeling of Thermophysical Properties and Transport Properties of Basic Combustion Products of Organic Substances

Yu. A. Bogdanova^{1, *}, S. A. Gubin¹, and Zh. A. Amir²

¹National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Kashirskoye sh. 31, Moscow, 115409 Russia

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, 050040 Republic of Kazakhstan

*e-mail: bogdanova.youlia@bk.ru

Received July 12, 2020; revised August 2, 2020; accepted August 5, 2020

Abstract—The thermophysical properties of the main combustion products of organic substances N_2 , O_2 , CO_2 , H_2 are calculated by the equation of state on the basis of perturbation theory under normal conditions and in the area of high pressures. The method of calculating the viscosity of individual substances based on the Chapman–Enskog equation using the values of the radial distribution function is analyzed.

Keywords: combustion products, fluid, radial distribution function, perturbation theory, equation of state, transport properties

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 004 + 519.245 + 530.145

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕМЕНТОВ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

© 2020 г. А. А. Новоселов^{a, *}, О. В. Павловский^{a, b, **}

^aФизический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

^bНИИ “Курчатовский Институт” – ИТЭФ, Москва, 117218 Россия

*E-mail: novoselov@goa.bog.msu.ru

**E-mail: ovp@goa.bog.msu.ru

Поступила в редакцию 07.08.2020 г.

После доработки 12.08.2020 г.

Принята к публикации 12.08.2020 г.

Рассматривается модель квантовомеханической системы, организованной по принципу нейронной сети. Роль нейронов играют квантовомеханические частицы эволюционирующие под действием внешнего потенциала с двумя минимумами. В качестве спайка выступает инстантон. Связь между нейронами обеспечивается потенциалом взаимодействия $V_{int}(\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j)$. Несимметричность потенциала взаимодействия обеспечивает направленность связи. Таким образом полный гамильтониан системы имеет вид $\hat{H} = \sum_i \left(\frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + V_0(\hat{\phi}_i) \right) + \sum_{i>j} V_{int}(\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j)$. Система рассматривается при помощи вычисления интегралов по траекториям методом Монте-Карло. Показано, что при определенном выборе параметров в данной системе возможна передача активности в длинных цепочках нейронов.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, интеграл по траекториям, метод Монте-Карло

DOI: 10.1134/S2079562920040144

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. Постановка задачи

Рассмотрим модель квантовомеханической системы, организованной по принципу нейронной сети. Нейронная сеть состоит из узлов (нейронов) и связей между ними (аксонов). Роль нейронов в модели будут играть квантовомеханические частицы $\hat{p}_i$, эволюционирующие под действием потенциала $\hat{H}_i = \frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + V_0(\hat{q}_i)$. Роль связей будет выполнять потенциал взаимодействия: $V_{int} = V_{int}(\hat{q}_i, \hat{q}_j)$. Таким образом полный гамильтониан системы будет иметь вид

$$\hat{H} = \sum_i \left(\frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + V_0(\hat{q}_i) \right) + \sum_{i>j} V_{int}(\hat{q}_i, \hat{q}_j). \quad (1)$$

Будем выбирать собственный потенциал нейрона так, чтобы он выполнял свою основную функцию — генерировать спайки. Потенциал взаимодействия выберем таким, чтобы он вызывал инстантон в некотором узле, если инстантон произошел в соседнем, но не наоборот — для этого он должен быть несимметричным.

Так как в общем случае нам потребуется иметь дело с достаточно сложными квантовомеханиче-

скими системами, то для описания их свойств мы будем использовать хорошо известный формализм Монте-Карло интегрирования континуальных интегралов. В евклидовом времени статистическая сумма системы имеет вид

$$Z = \int \prod_i \mathcal{D}q_i(\tau) \exp \left(-\frac{S(q_i(\tau))}{\hbar} \right), \quad q_i(0) = q_i(B), \quad (2)$$

где $q_i(\tau)$ — евклидова траектория i -ой частицы, $\beta \in [0, B]$ — евклидово время, а $S(q_i)$ — классическое действие:

$$S = \int_0^B dt \left[\sum_i \left(\frac{1}{2} \dot{p}_i^2 + V_0(\hat{q}_i) \right) + \sum_{i>j} V_{int}(\hat{q}_i, \hat{q}_j) \right]. \quad (3)$$

Наблюдаемые в данном формализме вычисляются как

$$\mathbb{O}(q_1, \dots, q_i) = \frac{1}{Z} \int \prod_i \mathcal{D}q_i(\tau) \mathbb{O}(q_1, \dots, q_i) \exp \left(-\frac{S(q_i)}{\hbar} \right). \quad (4)$$

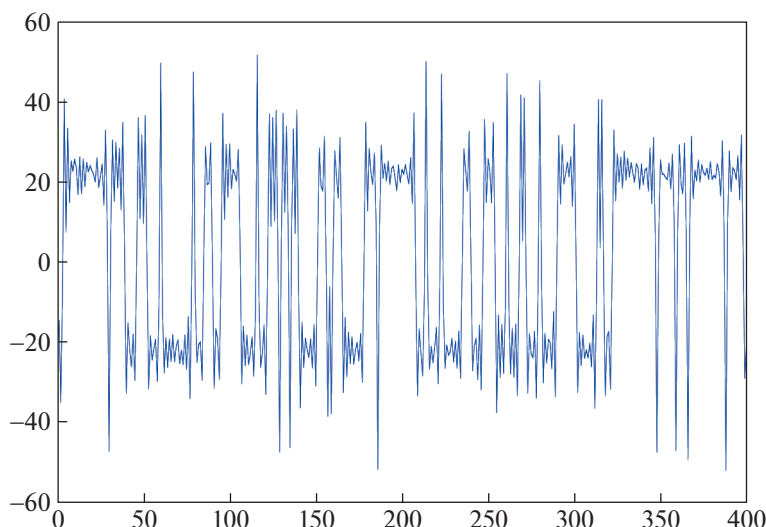


Рис. 1. Траектория свободного нейрона при малых Λ . Нейрон испытывает самопроизвольные спайки.

1.2. Методы решения

Работа нейронной сети основана на распространении активности от входных узлов (сенсоров) к выходным узлам. Сеть может состоять из многих узлов, поэтому для исследования такой сложной квантовой системы естественно применить метод Монте-Карло [1]. С помощью марковского процесса будут генерироваться траектории всех узлов сети q_i с статистическим весом, пропорциональным $\exp\left(-\frac{S(q_i)}{\hbar}\right)$. Для генерации траекторий в данной работе использовался многоуровневый алгоритм Метрополиса. Его использование обеспечивает подавление автокорреляций и позволяет повысить эффективность вычислений.

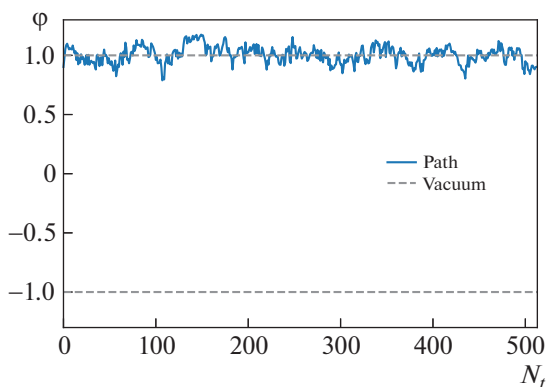


Рис. 2. Траектория свободного нейрона при больших Λ . Нейрон не испытывает самопроизвольных спайков.

2. КВАНТОВЫЕ НЕЙРОНЫ И ИХ СВЯЗИ

2.1. Один нейрон

Начнем рассмотрение нашей модели со случая одного нейрона. В качестве искусственного нейрона будет выступать частица, находящаяся в двухяном W -потенциале: $V_0(\varphi) = \frac{\lambda}{4}(\varphi^2 - 1)^2$. Выпишем лагранжиан такой системы:

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 + \frac{\Lambda}{4}(\varphi^2 - 1)^2. \quad (5)$$

Минимумы потенциальной энергии находятся в точках $\varphi = \pm 1$. Типичное квантовомеханическое поведение такой частицы — флуктуации в окрестности одного из вакуумов и быстрая смена вакуума — инстантон. Инстантоны сопровождаются пиком плотности действия, похожим на потенциал спайка биологического нейрона. Поэтому спайком такого нейрона будем называть инстантон. Также запишем величину классического действия для инстантона: [2]

$$S_{cl} = \frac{2\sqrt{2}\Lambda}{3}. \quad (6)$$

Эта величина понадобится нам для того, чтобы подобрать подходящее значение параметра Λ . Во-первых, мы хотим, чтобы флуктуации нашей частицы вокруг минимумов энергии были не очень большими. Во-вторых, спонтанные переходы из одного состояния в другое не должны случаться слишком часто. В нашем случае оптимальным оказалось $\Lambda = 5000$.

Параметры алгоритма Метрополиса были выбраны следующим образом: время (обратная температура) $T = 0.7$, количество временных слоев сетки $N_t = 512$. Для подавления автокорреляций

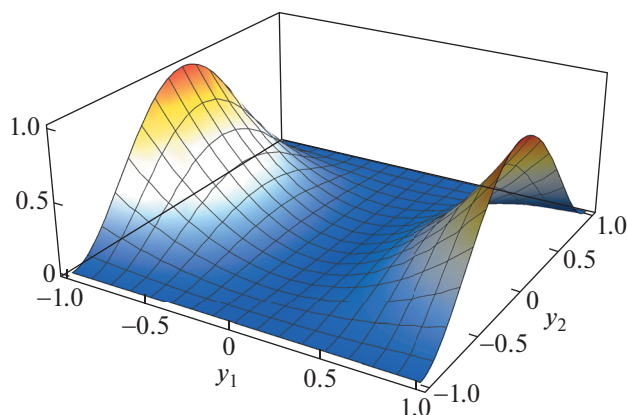


Рис. 3. Потенциал взаимодействия для передачи спайка.

использовалась длина термализации в $2 \cdot 10^6$ итераций. Для инициализации траектории использовалась “пила” из нулей и единиц: $\varphi_i^{\text{init}} = i \bmod 2$, где i — номер временного слоя узла сетки. Характерная термализованная траектория представлена на рис. 1 и рис. 2.

2.2. Два нейрона

Перейдем теперь к случаю двух взаимодействующих нейронов. Мы хотим, чтобы спайк в одном из них вызывал спайк в другом, но спайк во втором по возможности никак не влиял на первый. Для этого лагранжиан взаимодействия таких нейронов должен быть несимметричным, кроме того, он должен содержать константу связи, с помощью которой можно регулировать действие одного нейрона на другой. Выберем его в виде:

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = \epsilon_{\text{exc}} \varphi_2^2 (\varphi_1^2 - 1)^2. \quad (7)$$

Если φ_1 находится в вакууме, то на φ_2 нет никакого воздействия. Однако, если φ_1 испытывает спайк, то и φ_2 тоже имеет тенденцию к спайку. Таким образом активность передается от узла к узлу.

График потенциала такого взаимодействия изображен на рис. 3. По оси y_1 отложен возбуждающий нейрон, а по оси y_2 — возбуждаемый. Если оба нейрона находятся в вакуумах (вакуум соответствует нахождению в одном из углов), то только переход первого нейрона производит воздействие на другой нейрон.

Для представления входной информации мы будем использовать входные нейроны. Каждый входной нейрон может быть пассивным (вообще

Потенциальная энергия

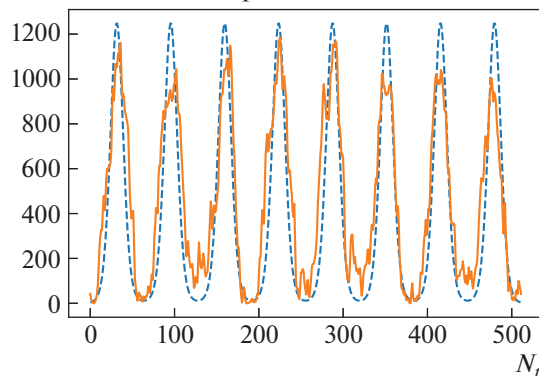


Рис. 4. Потенциальная энергия возбуждаемого нейрона (сплошная линия) коррелирует с потенциальной энергией входного нейрона (пунктирная линия).

не влияет на другие, поэтому может быть отброшен) или активным. Активные входные нейроны имеют фиксированную траекторию (в отличие от моделируемых нейронов, траектория которых эволюционирует во время моделирования), который состоит из классических решений—инстантонов. Потенциальная энергия такого входного нейрона изображена на рис. 4 (пунктирная линия). Каждый пик потенциальной энергии соответствует инстантону. Сплошная линия представляет потенциальную энергию одиночного нейрона, возбуждаемого входным нейроном.

Введем величину активности моделируемого нейрона как отношение интегральной потенциальной энергии этого нейрона к потенциальной энергии входного нейрона (например, активность нейрона, который никогда не покидает вакуумного состояния, будет равна 0, а активность нейрона, траектория которого повторяет траекторию входного нейрона, будет равна 1). Чтобы исследовать различные схемы, мы будем изучать графики активности некоторых нейронов в зависимости от константы связи ϵ_{exc} .

Для изучения различных конфигураций нейронов введем модулирующий фактор k . После того, как мы выберем соответствующий параметр $\hat{\epsilon}$ для каждой связи, мы умножим каждый из них на этот коэффициент, чтобы получить новые константы связей $\epsilon = k \cdot \hat{\epsilon}$ и затем отобразим активность интересующего нейрона как функцию одного параметра k .

Было обнаружено, что ϵ_{exc} может принимать значения в диапазоне от 3000 до 8000 (рис. 5). В случае слишком малых ϵ_{exc} нейроны почти не взаимодействуют, а если значение ϵ_{exc} слишком вели-

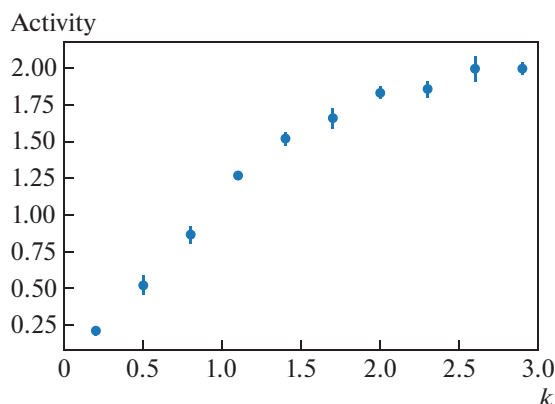


Рис. 5. Активность выходного нейрона возрастает как функция константы связи.

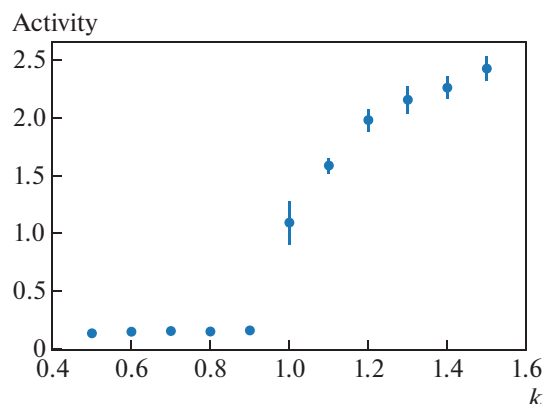


Рис. 6. Активность выходного нейрона (3-го в цепочке) как функция константы связи. $\varepsilon_1 = k \cdot 1.5 \cdot 10^4$, $\varepsilon_2 = k \cdot 1.0 \cdot 10^4$, $\varepsilon_3 = k \cdot 0.5 \cdot 10^4$.

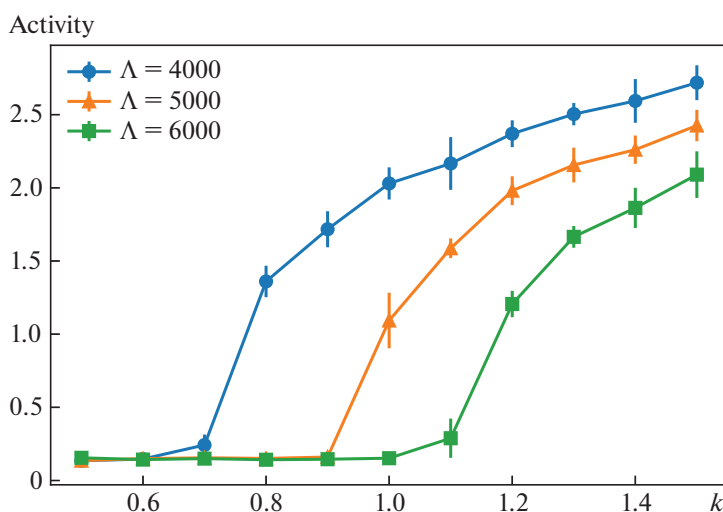


Рис. 7. Активность выходного нейрона (в цепи из трех) как функция Λ .

ко, их собственные потенциалы становятся незначительными по сравнению с взаимодействием, что приводит к нежелательной задержке нейронов в состоянии $\varphi = 0$. График для $\varepsilon_{\text{ex}} = 6000$ представлен на рис. 4. В симуляции, представленной на рис. 4, активность выходного нейрона оказалась равна 0.92.

Также можно передать импульс по цепочке из нескольких нейронов. Рассмотрим линию из трех последовательно соединенных связями нейронов (рис. 6). В этом случае выберем $\varepsilon_1 = k \cdot 1.5 \cdot 10^4$, $\varepsilon_2 = k \cdot 1.0 \cdot 10^4$, $\varepsilon_3 = k \cdot 0.5 \cdot 10^4$. Как видно из рис. 6, при малых значениях константы связи ε , спайки не проходят через цепочку нейронов, но

если ε достигает некоторого критического значения, цепочка становится проводящей для спайков. Этот эффект позволяет нам контролировать проводимость нейронной сети путем небольшого изменения константы связи ε . Таким образом, контролируя константу связи, мы можем реализовать сложные логические соединения в нашей нейронной сети.

Зависимость активности нейронов от параметра Λ показана на рис. 7. Из этого рисунка видно, что критическое значение константы связи ε зависит от Λ . Очевидно, что такая зависимость критического значения ε связана с увеличением действия инстантона.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Была предложена модель нейрона, основанная на поведении частицы в двухуровневой системе. Для моделирования такой квантовомеханической системы использовалось вычисление интегралов по траекториям методом Монте-Карло. Был предложен конкретный вид потенциала частицы, кроме того были предложены потенциалы взаимодействия частиц, позволяющий передавать возбуждения. Отметим также и недостатки предложенной модели. Во-первых, так как выходная функция сети не может быть аналитически продифференцирована по величинам связей внутри сети, мы не можем применять алгоритм обратного распространения ошибки для обучения сети. Поэтому обучение сети представляется возможным лишь при помощи куда более медленных генетических алгоритмов. Во-вторых, стоит вообще отметить общую проблему скорости вычислений. Моделирование более-менее сложных

сетей потребует привлечения очень больших вычислительных мощностей.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [5] и при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 16-12-10059-П).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Ceperley D.M. // *Rev. Mod. Phys.* 1995. V. 67. P. 279.
2. Polyakov A.M. *Gauge Fields and Strings*. 1987. London: Harwood Academic Publishers.
3. Voevodin V.I., Antonov A.S., Nikitenko D.A., Shvets P.A., Sobolev S.I., Sidorov I.Yu., Stefanov K.S., Voevodin V.I., Zhuravskiy S.A. // *Supercomput. Front. Innovat.* 2019. V. 6. No. P. 4–11.
<https://doi.org/10.14529/jsfi190201>.

Quantum Mechanical Model of Neuron Network Elements

A. A. Novoselov^{1, *} and O. V. Pavlovsky^{1, 2, **}

¹ Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

² Alikhanov Institute for Theoretical and Experimental Physics, National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, 117218 Russia

*e-mail: novoselov@goa.bog.msu.ru

**e-mail: ovp@goa.bog.msu.ru

Received August 7, 2020; revised August 12, 2020; accepted August 12, 2020

Abstract—A model of a quantum-mechanical system organized by the principle of a neural network is considered. The role of neurons is played by quantum particles evolving under the action of an external double-well potential. The instanton acts as a spike. The connection between neurons is provided by the interaction potential $V_{\text{int}}(\hat{q}_i, \hat{q}_j)$. The connection is directional due to asymmetry of the interaction potential. Thus, the complete Hamiltonian of the system is $\hat{H} = \sum_i \left(\frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + V_0(\hat{q}_i) \right) + \sum_{i>j} V_{\text{int}}(\hat{q}_i, \hat{q}_j)$. The system is investigated by PIMC method. It is shown that with a certain choice of parameters in this system, the transfer of activity in long chains of neurons is possible.

Keywords: artificial neuron network, path integral, PIMC

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 538.9

ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ТОРИЯ, ИМПЛАНТИРОВАННОГО В ОКСИД КРЕМНИЯ

© 2020 г. У. Н. Курельчук^{a, *}, П. В. Борисюк^a, А. В. Николаев^{a, b}, Е. В. Ткаля^{a, c, d}

^aНациональный исследовательский ядерный университет МИФИ, Каширское шоссе 31, Москва, 115409 Россия

^bИнститут ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.С. Ломоносова,
Ленинские горы 1, Москва, 119991 Россия

^cФизический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский пр. 53, Москва, 119991 Россия

^dИнститут проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Большая Тульская 52, Москва, 115191 Россия

*E-mail: UNKurelchuk@mephi.ru

Поступила в редакцию 02.12.2020 г.

После доработки 06.12.2020 г.

Принята к публикации 14.12.2020 г.

В рамках теории функционала плотности проведено исследование атомов тория, имплантированных в оксид кремния. Изучены зарядовые свойства Th в соединениях $\text{ThO}_2:n\text{SiO}_2$ и $\text{Th}:n\text{SiO}_2$, где Th выступает в качестве примеси внедрения и замещения в кристобалите. Проведена геометрическая оптимизация структур с учетом межэлектронных взаимодействий, исследовано самосогласованное распределение электронной плотности, оценены бейдеровские эффективные заряды.

Ключевые слова: торий-229, ядерный переход, фотоэлектронная спектроскопия, оксид кремния, теория функционала плотности, распределение электронной плотности, эффективный заряд

DOI: 10.1134/S2079562920040090

ВВЕДЕНИЕ

В спектре возбуждения ядра ^{229}Th есть уникальный низколежащий изомерный уровень, энергия которого в настоящее время оценивается в 8.10 ± 0.17 эВ [1]. За последние 30 лет в экспериментальных [2–5] и теоретических [6–28] исследованиях этого ядерного перехода был выявлен ряд необычных свойств, связанных с особенностями взаимодействия ядра с окружающей электронной оболочкой и химическим окружением. Среди них – распад и возбуждение изомера через электронный мост, возбуждение фотонами и электронами в лазерной плазме, конверсия на электронах проводимости в металле, относительно быстрый альфа-распад и многие другие.

Одна из интересных особенностей изомера – зависимость вероятности распада от зарядового состояния электронной оболочки атома тория. В работах [22, 23] было показано, что в ионах тория, имплантированных в диэлектрик с большой шириной запрещенной зоны, распад возбужденного состояния ядра ^{229m}Th происходит с излучением гамма-кванта, а канал внутренней электронной конверсии, доминирующий в обычных условиях, оказывается полностью подавленным в результате энергетического запрета. Указанное свойство ядерного перехода позволяет использовать его для

создания принципиально нового ядерного стандарта времени и частоты с относительной стабильностью на уровне 10^{-19} – 10^{-20} [24–26], а также в качестве источника когерентного гамма-излучения VUV диапазона (гамма-лазер) с длиной волны излучения около 150 нм [27, 28]. Таким образом, ядерный переход из состояния $^{229m}\text{Th}(3/2^+, 8.1 \text{ эВ})$ представляет интерес как для фундаментальной науки, так и для очень важных технологических приложений.

Так как вероятность распада зависит от зарядового состояния электронной оболочки тория, для прикладных задач важно, чтобы экспериментальные схемы позволяли дифференцировать процессы распада изомера по разным каналам, в соответствии с временем распада, с тем, чтобы подавлять или стимулировать один из них. В работе [29] была предложена оригинальная схема для наблюдения радиационного распада изомера с регистрацией излучения VUV диапазона – “ионы Th в матрице широкозонного VUV-прозрачного диэлектрика”. Методом импульсной лазерной имплантации осуществляется внедрение ионов Th в матрицу SiO_2/Si , полученную методом термического окисления. Большая ширина запрещенной зоны подложки (~ 9 эВ) позволяет подавить быстрый распад по каналу внутренней конверсии и увеличить время жизни изомера

^{229m}Th до десятков минут за счет преобладания медленного радиационного канала [30]. В рамках данной концепции ведется подбор оптимальных параметров схемы, исследование энергетических уровней имплантата в SiO_2 . Так как энергия связи $4f_{7/2}$ электронов тория, полученная из линий рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) [31] оказалась близкой к состояниям тория в ThSiO_4 [32], был сделан вывод о том, что эффективный заряд тория, имплантированного в подложку аморфного SiO_2/Si должен быть близок к +4, как и в ThSiO_4 . В той же работе было проведено моделирование ширины запрещенной зоны в структурах типа $\text{ThO}_2:n\text{SiO}_2$ методом функционала электронной плотности (ФЭП) с использованием псевдопотенциала тория, и показано, что теоретические результаты совпадают с экспериментальными при следующем соотношении на число атомов: $\text{Th}/\text{Si} < 0.4$. Отметим, что в экспериментальной работе [29] концентрация имплантированных атомов Th составляла меньше 1% ($\text{Th}/\text{Si} \sim 0.03$).

Основная цель данной работы – исследование состояния электронной оболочки ионов тория имплантированных в матрицу SiO_2 методом лазерной имплантации. Согласно полученным ранее данным, количество атомов и морфология получаемых при лазерной имплантации образцов соответствует соединению на основе силиката тория ThSiO_4 [31, 32]. Если доля имплантированных ионов тория существенно меньше единицы, то в приближении эффективной среды [33] исследуемый комплекс может быть записан в конфигурации $\text{ThO}_2:n\text{SiO}_2$, где атом тория участвует как примесь замещения. Расчет электронной структуры данной атомарной конфигурации позволит получить информацию об изменении оболочки тория под влиянием окружения SiO_2 , а также о зарядовом состоянии ионов тория после имплантации (окисление кислородом из атмосферы и имплантация в виде ThO_2). Альтернативная модель, когда ион тория при имплантации нейтрализуется за счет взаимодействия с поверхностью и внедряется в матрицу с полностью заполненной валентной оболочкой, может быть описана в приближении нейтрального атома тория, выступающего как примесь внедрения $\text{Th}:n\text{SiO}_2$. Модель торий–примесь внедрения использовалась в работе в качестве репера при сравнительном анализе перераспределения валентных электронов за счет влияния диэлектрической матрицы и использовалась.

Выходным результатом таких расчетов должны стать волновые функции валентных электронов Th, которые будут использованы для изучения каналов возбуждения и распада низлежащего изомерного состояния $3/2^+(8.10 \text{ эВ})$ ядра ^{229}Th в указанной матрице. Проверочными пара-

метрами таких расчетов могут служить, прежде всего, вычисленные эффективные заряды, которые также могут быть получены методом РФЭС по сдвигу остовных уровней [34].

В настоящей работе в рамках теории функционала плотности проведено исследование зарядового состояния тория, имплантированного в SiO_2 , в различных суперячейках. Эти ячейки, состоящие из SiO_2 , использовались для моделирования ближайшего окружения тория при его различных концентрациях и в различных положениях. При этом проводилась полная геометрическая оптимизация (релаксация) всего комплекса с учетом межэлектронных взаимодействий и рассчитывалась энергия его основного состояния. На основе полученной самосогласованной электронной плотности $n(\mathbf{r})$, анализировалось изменение электронной плотности в непосредственной близости от ядра тория и вычислялись эффективные заряды тория методом Бейдера [35, 36].

МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Эффективным методом численного моделирования и исследования электронных свойств материалов сегодня является теория функционала электронной плотности (ТФЭП). В данной работе исследование влияния атомного окружения на зарядовое состояние тория проводилось в рамках ТФЭП с помощью программного пакета Quantum Espresso [37], использующего концепцию псевдопотенциала для остовных электронов и базис, состоящий из плоских волн. В качестве выходных результатов квантовых расчетов для периодических электронных систем выступает электронная зонная структура и плотность электронных состояний. На их основе получают ширину запрещенной зоны, которую можно сопоставить с экспериментальным РФЭС спектром. Существует особенность некоторых приближений ТФЭП – это, в первую очередь, недооценка ширины запрещенной зоны для широкозонных диэлектриков. Одной из причин расхождения является взаимодействие электронов и дырок, который относится к многоэлектронным эффектам, не учитываемых ТФЭП. Для корректного описания спектров РФЭС, фотоэмиссионных и обратно-фотоэмиссионных распространен подход несамосогласованной коррекции спектра собственных энергий E_i с учетом электронно-дырочных возмущений (приближения GW, G_0W_0) [38]. В данной работе мы не ставили задачу точного определения щели запрещенных состояний. В первую очередь мы анализировали теоретически точную величину – самосогласованную электронную плотность $n(\mathbf{r})$. Для количественных оценок вычислялись изменения зарядовой плотности и эффективные заряды атомов, используя метод Бейдера топологического анализа функции электронной плотности

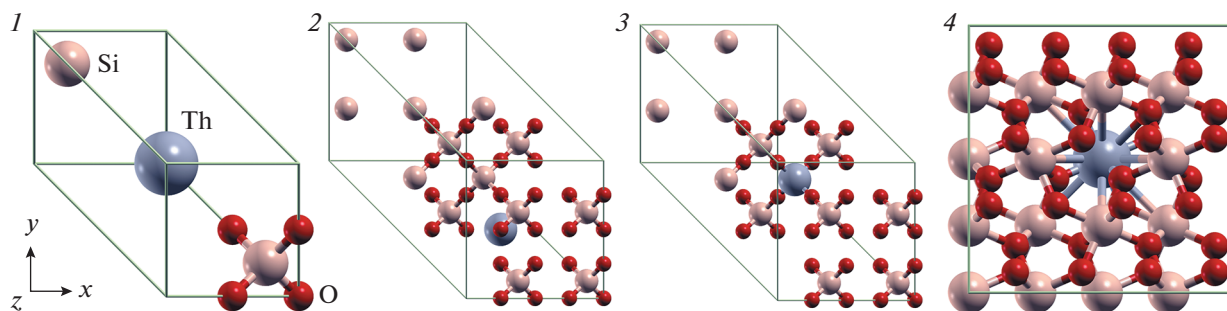


Рис. 1. Четыре модели локального окружения тория, имплантированного в SiO_2 : 1 – Th:2SiO_2 , 2 – Th:16SiO_2 , 3 – Th:15SiO_2 , 4 – $\text{ThO}_2\text{:31SiO}_2$.

$n(\mathbf{r})$. Отметим, что градиентный метод Бейдера позволяет разделить общее пространство на составные части, каждая из которых относится к определенному атому, и, таким образом, соотнести с каждым атомом определенный эффективный заряд.

В работе [29] изучалась имплантация ионов тория в матрицу аморфного оксида кремния, полученного методом термического окисления, на подложке $\text{Si}(001)$. Наблюдаемая плотность аморфного оксида кремния оказалась близкой к плотности кристаллита $\sim 2.3 \text{ г/см}^3$. Кроме того, в структуре аморфа сохранялись структурные тетраэдры SiO_4 , характерные для кристаллита и кварца. Поэтому в качестве приближения при моделировании аморфного состояния оксида кремния обычно используется кристаллит [39].

МОДЕЛИ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ЗАРЯД ТОРИЯ

1. Результаты для нерелаксированных ячеек

Сначала мы изучали электронное состояние тория помещенного в периодические структуры, показанные на рис. 1. При этом геометрическое положение атомов в элементарных ячейках не менялось (то есть, геометрия ячеек не оптимизировалась). Торий рассматривался как примесь внедрения и замещения, с атомными соотношениями Th/Si от 1 до 0.03. Стоит заметить, что результаты тестовых моделей в отсутствии релаксации и с расчетами на минимальном количестве точек – неточны, однако, поскольку недостаточность сеток является систематической для всех, то они могут служить иллюстрацией того, как влияет величина модельной ячейки и характер примеси тория в них на его зарядовое состояние.

Модель с замещением одного атома Si атомом Th может описывать попадание иона Th^{n+} в образец в стадии релаксации в междоузлии, когда налетающие ионы к моменту имплантации уже присоединили кислород из атмосферы, и имеет место конфигурация $\text{ThO}_2\text{:}n\text{SiO}_2$. Модель с внедре-

нием $\text{Th:}n\text{SiO}_2$ может служить для сравнительной оценки изменения заряда в случае изначально нейтрального атома в нейтральном окружении.

Минимальная тестовая ячейка Th:2SiO_2 была задана из 6 атомов Si и O, и внедренного в междоузлие Th, так что отношение Th/Si составляет 1/2 (1, рис. 1). Вторая тестовая ячейка Th:16SiO_2 состоит из 48 атомов Si и O, и внедренного Th ($\text{Th}/\text{Si} = 16$) (2, рис. 1). В третьей ячейке $\text{ThO}_2\text{:15SiO}_2$, состоящей из 48 атомов, Th замещает один из атомов Si, примесь замещения локально представляет собой модель оксида тория ($\text{Th}/\text{Si} = 15$) (3, рис. 1). Четвертая ячейка $\text{ThO}_2\text{:31SiO}_2$ задана из 96 атомов с Th замещающим Si в центре и $\text{Th}/\text{Si} = 31$ (4, рис. 1). Ячейки 1 – 3 – ГЦК, 4 – кубическая.

Было рассчитано основное состояние ячеек, изображенных на рис. 1, методом ТФЭП в приближении GGA PBE с псевдопотенциалами в полнорелятивистском приближении. В качестве валентных электронных состояний, были взяты валентные и субвалентные состояния, которые описаны полнорелятивистскими PAW псевдопотенциалами Si ($3s^2 3p^2$), O ($2s^2 2p^4$), Th ($6s^2 7s^2 6p^6 6d^1 5f^1$) содержащие остовные функции, необходимые для восстановления полноэлектронной плотности [40, 41]. Самосогласованный расчет основного состояния (SCF) был проведен в точках (0 0 0) и (0 0.5 0) неприводимой зоны Бриллюэна (НЗБ) для ГЦК ячеек и точках (0 0 0) и (0.5 0.5 0.5) – для кубической. Энергия обрезания базиса плоских волн 1500 эВ.

Изменение зарядовой плотности тория по сравнению со свободным атомарным состоянием определим величиной N_{eff} в единицах электронного заряда e как $N_{\text{eff}} = N_{\text{pseudo}} - N_{\text{bader}}$, где N_{pseudo} – число псевдовалентных электронов свободного тория, заданных псевдопотенциалом (общее число – 12), а N_{bader} – число псевдовалентных электронов тория в окружении, вычисленное методом Бейдера. N_{eff} можно понимать и как ионность или эффективный заряд. Результаты показаны в табл. 1.

Таблица 1. Оценка эффективных зарядов Th в нерелаксированных модельных ячейках

Ячейка	(1) Th:2SiO ₂ Th примесь внедрения, Th/Si = 1/2	(2) Th:16SiO ₂ Th примесь внедрения, Th/Si = 1/16	(3) ThO ₂ :15SiO ₂ Th примесь замещения, Th/Si = 1/15	(4) ThO ₂ :31SiO ₂ Th примесь замещения, Th/Si = 1/31
$N_{\text{eff}} = N_{\text{pseudo}} - N_{\text{bader}}$	1.0	0.8	5.1	4.8

Из данных, показанных в табл. 1, следует, что Th в качестве примеси замещения теряет свою электронную плотность (N_{eff} составляет 4.8 и 5.1), что ожидаемо, поскольку его окружают 4 атома кислорода, за которыми следуют тетраэдры SiO₄ (см. рис. 1). В случае внедрения тория между тетраэдрами SiO₄ плотность его валентных электронов так же уменьшается, что соответствует примерно потере одного электрона. Можно также отметить, что электронная разность на тории уменьшается по мере увеличения размера модельной ячейки.

Стоит обратить внимание, что оценки эффективного заряда Th для тестовых ячеек, очевидно, систематически завышены, поскольку превышают число электронов атома Th за пределами радионовой оболочки — 4. Это вызвано, во-первых тем, что ячейки не были оптимизированы, а во-вторых, недостаточной точностью самосогласованного расчета в одной точке НЗБ и полноэлектронной плотности $n(\mathbf{r})$ на минимальной пространственной сетке. Поскольку сеточная недостаточность является систематической для всех приведенных моделей, то результаты могут служить лишь общей иллюстрацией поведения эффективного заряда. Для детального исследования необходимо оптимизировать координаты и уплотнить сетки.

Согласно РФЭ спектрам, приведенным в [31], энергия связи имплантированного в SiO₂ Th близка к энергии связи в ThSiO₄. В структуре

ThSiO₄, согласно данным базы Materials Project [42], длина связи Th—О составляет 2.4–2.9 Å, а Si—О в структурных тетраэдрах — около 1.6 Å. Рассмотрим более детально следующие модели окружения.

2. Результаты для релаксированной ячейки ThO₂:15[SiO₂]

Рассмотрим ГЦК-ячейку кристобалита, состоящую из 48 атомов, с Th, замещающим один атом Si в центре: такую конфигурацию можно представить как ThO₂:15(SiO₂), с концентрацией оксида тория (ThO₂) 2%, Th/Si = 1/15 (3, рис. 1). Методически, сначала были оптимизированы координаты ячейки без тория методом Бройдена—Флетчера—Гольдфарба—Шанно (BFGS) и ТФЭП [43–46]. Релаксация проводилась до достижения порога сил, действующих на атом 0.01 эВ/Å, энергии 10^{–3} эВ, с самосогласованным решением уравнений Кона—Шема в точке Г (000) с критерием сходимости по энергии 10^{–6} эВ. Затем один атом Si в центре заменен на Th и проведена дополнительная оптимизация (релаксация) решетки и координат атомов ячейки с теми же параметрами плюс с пороговым значением давления в ячейке 0.5 кбар. При релаксации валентные состояния описывались ультрамягкими псевдопотенциалами Si (3s2 3p2), O (2s2 2p4), Th (6s2 7s2 6p6 6d1 5f1), энергия обрезки базиса плоских волн 1500 эВ. Ячейка после релаксации и ее структурные характеристики показаны на рис. 2.

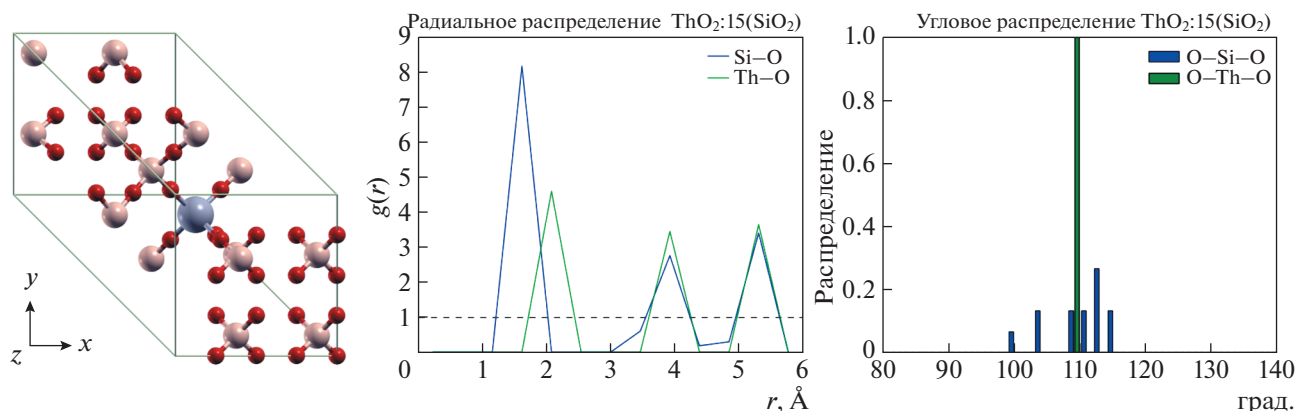


Рис. 2. Модельная ячейка ThO₂:15SiO₂ и ее морфологические характеристики: распределение длин связей Si—О и Th—О, углов связей O—Si—O и O—Th—O.

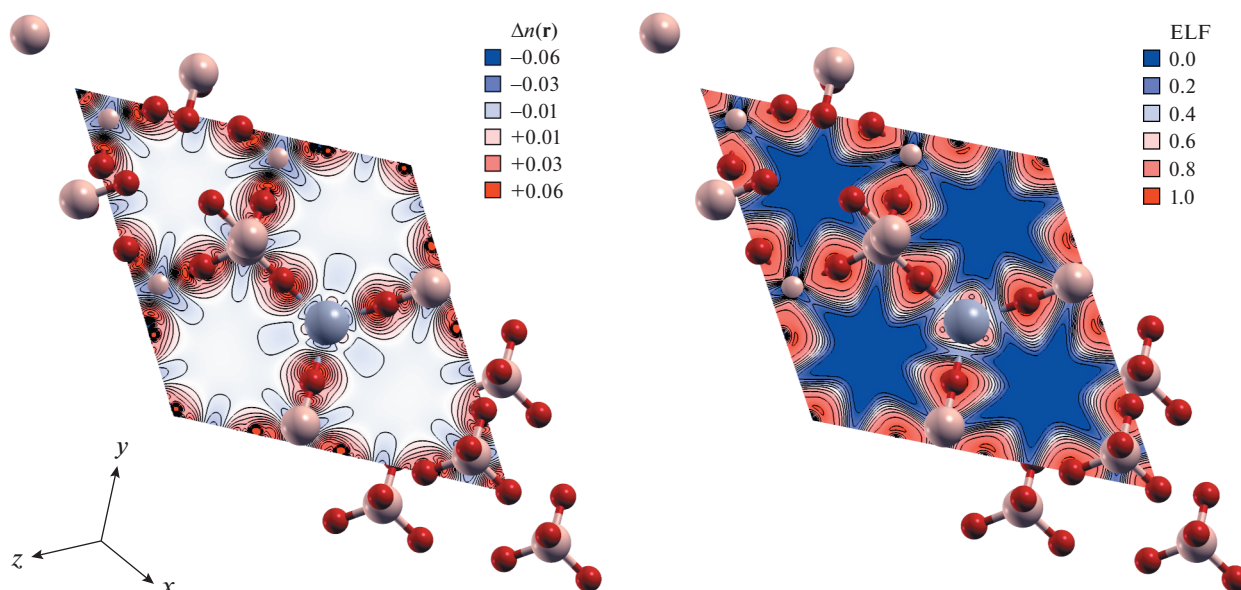


Рис. 3. Карта деформации электронной плотности $\Delta n(\mathbf{r})$ (слева) и функции локализации электронов ELF в ячейке $\text{ThO}_2:15\text{SiO}_2$ (справа). Плоскость сечения $[yz]$ проходит через координаты Th, черным цветом показаны изолинии, соответствующие цветовой сетке.

После релаксации с произвольным параметром решетки плотность изменилась с 2.37 до 2.19 г/см³, длина связи Th–O составила ~ 2.1 Å, Si–O ~ 1.6 Å, при этом в ближайшем окружении атома Th по-прежнему находились 4 атома кислорода. Как видно из рис. 2, координация кристобалита – структурные тетраэдры SiO_4 – при этом практически не изменилась, углы связей O–Si–O 100° – 115° оказались слабо меняющимися за счет молекулярного комплекса O–Th–O.

Для полученной структуры был проведен расчет основного состояния методом самосогласованного поля со скалярно-релятивистскими PBE–PAW псевдопотенциалами, на сетке $240 \times 240 \times 240$ в прямом пространстве и k -сетке $4 \times 4 \times 4$ в обратном (НЗБ). Были получены валентная самосогласованная плотность основного состояния $n(\mathbf{r})$, а также плотность $n_{\text{val}}(\mathbf{r})$ валентных электронов и восстановленная с помощью PAW-псевдопотенциалов полноэлектронная плотность $n_{\text{tot}}(\mathbf{r})$. На рис. 3 изображена карта величины деформации электронной плотности $\Delta n(\mathbf{r})$ – разности зарядовой плотности $n(\mathbf{r})$ ячейки и суперпозиции плотностей изолированных атомов. Для иллюстрации перераспределения электронной плотности также вычислена функция локализации электронов ELF – двухэлектронное условное распределение вероятности, которое описывает вероятность нахождения электрона на расстоянии r от заданного электрона с тем же спином [47, 48].

На рис. 3 областям с большими значениями ELF соответствуют области локализации элек-

тронных пар. Количественное изменение зарядовой плотности Th за счет окружения в ячейке $\text{ThO}_2:15\text{SiO}_2$ по сравнению со свободным атомом рассчитывалось как N_{eff} разность числа электронов в псевдопотенциале и бейдеровского числа псевдовалентных электронов, и составила $-2.8e$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено зарядовое состояния тория, имплантированного в оксид кремния. Рассчитывались структуры Th в соединениях $\text{ThO}_2:n\text{SiO}_2$ и $\text{Th}:n\text{SiO}_2$, где Th выступает в качестве примеси внедрения и замещения. Проведена геометрическая оптимизация структур с учетом межэлектронных взаимодействий, исследовано самосогласованное распределение электронной плотности, оценены бейдеровские эффективные заряды. Исследовано перераспределение электронной плотности нейтрального тория и окисленного ThO_2 за счет окружения SiO_2 . Оценочные расчеты показывают, что в обоих случаях имеет место утечка электронной плотности тория, слабая для нейтрального имплантата и значительная для окисленного. Для модели $\text{ThO}_2:15\text{SiO}_2$ проведено полное исследование методом ТФЭП: релаксация межатомных сил со свободным параметром решетки, а затем самосогласованный расчет электронной плотности основного состояния $n(\mathbf{r})$ на угаданных сетках в прямом обратном пространстве. Получен бейдеровский эффективный заряд Th (+2.8) и карта

распределения дефекта электронной плотности и функции электронной локализации, характеризующую образование электронных пар в окружении Th.

Следующей ступенью уточнения расчетных моделей является получение энергетического спектра, корректного описывающего спектр эмиссионных рентгеновских фотоэлектронов в широкозонном диэлектрике: например методом несамосогласованной коррекция спектра собственных энергий E_i с учетом электронно-дырочных возмущений. В этом случае могут быть предсказаны и сравнены с экспериментальными и частично-энергетические величины — энергии связи уровней и атомов в молекуле, плотность электронных состояний и зонная структура, щель запрещенных состояний.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда No. 19-72-30014.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Sikorsky T., Geist J.* // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 125. P. 142503.
2. *Helmer R.G., Reich C.W.* // Phys. Rev. C. 1994. V. 49. P. 1845.
3. *Beck B.R., Becker J.A., Beiersdorfer P. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 142501.
4. *Von der Wense L., Seiferle B., Laatiaoui M. et al.* // Nature (London). 2016. V. 533. P. 47.
5. *Seiferle B., Von der Wense L., Bilous P.V. et al.* // Nature (London). 2019. V. 573. P. 243.
6. *Strizhov V.F., Tkalya E.V.* // Sov. Phys. JETP. 1991. V. 72. P. 387.
7. *Tkalya E.V.* // Sov. J. Nucl. Phys. 1992. V. 55. P. 1611.
8. *Tkalya E.V.* // JETP Lett. 1992. V. 55. P. 211.
9. *Kalman P., Keszthelyi T.* // Phys. Rev. C. 1994. V. 49. P. 324.
10. *Tkalya E.V., Varlamov V.O., Lomonosov V.V., Nikulin S.A.* // Phys. Scr. 1996. V. 53. P. 296.
11. *Porsev S.G., Flambaum V.V., Peik E., Tamm C.* // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105. P. 182501.
12. *Muller R.A., Volotka A.V., Surzhykov A.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 99. P. 042517.
13. *Borisyuk P.V., Kolachevsky N.N., Taichenachev A.V., Tkalya E.V., Tolstikhina I.Y., Yudin V.I.* // Phys. Rev. C. 2019. V. 100. P. 044306.
14. *Dzyublik A.Y.* // Phys. Rev. C. 2020. V. 102. P. 024604.
15. *Dykhne A.M., Tkalya E.V.* // JETP Lett. 1998. V. 67. P. 549.
16. *Flambaum V.V.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. P. 092502.
17. *Tkalya E.V.* // Laser Phys 2004. V. 14. P. 360.
18. *Arutyunyan R.V., Bolshov L.A., Vikharev V.D. et al.* // Sov. J. Nucl. Phys. 1991. V. 53. P. 23.
19. *Tkalya E.V.* // Phys. Rev. A. 2007. V. 75. P. 022509.
20. *Tkalya E.V.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120. P. 122501.
21. *Tkalya E.V.* // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124. P. 242501.
22. *Tkalya E.V.* // JETP Lett. 2000. V. 71. P. 311.
23. *Tkalya E.V., Zherikhin A.N., Zhudov V.I.* // Phys. Rev. C. 2000. V. 61. P. 064308.
24. *Peik E., Tamm C.* // Europhys. Lett. 2003. V. 61. P. 181.
25. *Campbell C.J., Radnaev A.G., Kuzmich A. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. P. 120802.
26. *Peik E., Okhapkin M.* // C. R. Phys. 2015. V. 16. P. 516.
27. *Tkalya E.V.* // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. P. 162501.
28. *Tkalya E.V., Yatsenko L.P.* // Laser Phys. Lett. 2013. V. 10. P. 105808.
29. *Borisyuk P.V., Chubunova E.V., Kolachevsky N.N., Vasiliev O.S., Tkalya E.V.* // Phys. Status Solidi A. 2020. V. 217. P. 1900551.
30. *Beck B.R. et al.* // Report LLNL-PROC-415170.
31. *Borisyuk P.V., Chubunova E.V., Lebedinskii Y.Y., Tkalya E.V., Vasilyev O.S., Yakovlev V.P., Strugovshchikov E., Mamedov D., Pishishev A., Karazhanov S.Z.* // Laser Phys. Lett. 2018. V. 15. P. 056101.
32. *Teterin Y.A., Utkin I.O., Melnikov I.V., Lebedev A.M., Teterin A.Y., Ivanov K.E., Nikitin A.S., Vukchevich L.* // J. Struct. Chem. 2000. V. 41. P. 1167.
33. *Bruggemann A.G.* // Ann. Phys. 1935. V. 24. P. 636.
34. *Бруэгс Д., Сух М.П.* // Анализ поверхности методами Оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. 1987. Москва: Мир.
35. *Sanville E., Kenny S.D., Smith R., Henkelman G.* // J. Comput. Chem. 2007. V. 28. P. 5.
36. *Tang W., Sanville E., Henkelman G.* // J. Phys.: Comput. Mater. 2009. V. 21. P. 084204.
37. *Giannozzi P. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 29. P. 465901.
38. *Aulbur W.G., Jönsson L., Wilkins J.W.* // Solid State Phys. 2000. V. 54. P. 1.
39. *Martin-Samos L., Bussi G., Ruini A., Molinari E., Caldas M.* // J. Phys. Status Solidi B. 2011. V. 248. P. 1061.
40. *Prandini G., Mazzaro A., Castelli I.E., Mounet N., Marzari N.* // npj. Comput. Mater. 2018. V. 4. P. 72.
41. *Lejaeghere K. et al.* // Science (Washington, DC, USA). 2016. V. 351 (6280). P. 1415.
42. *Materials Data on ThSiO₄* <https://materialsproject.org/docs/calculations> <https://doi.org/10.17188/1295645>
43. *Broyden C.G.* // IMA J. Appl. Math. 1970. V. 6(1). P. 76.
44. *Fletcher R.* // Comput. J. 1970. V. 13. P. 317.
45. *Goldfarb D.* // Math. Comput. 1970. V. 24. P. 23.
46. *Shanno D.F.* // Math. Comput. 1970. V. 24. P. 647.
47. *Becke A.D., Edgecombe K.E.* // J. Chem. Phys. 1990. V. 92. P. 5397.
48. *Fuentealba P., Chamorro E., Santos J.C.* // Theor. Comput. Chem. 2007. V. 19. P. 57.

Charge Properties of Thorium Implanted in Silicon Oxide

U. N. Kurelchuk^{1, *}, P. V. Borisjuk¹, A. V. Nikolaev^{1, 2}, and E. V. Tkalya^{1, 3, 4}

¹ National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

² Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University (SINP MSU), Moscow, 119991 Russia

³ Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

⁴ Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (IBRAE RAN), Moscow, 115191 Russia

*e-mail: UNKurelchuk@mephi.ru

Received December 2, 2020; revised December 6, 2020; accepted December 14, 2020

Abstract—A study of thorium atoms implanted in silicon oxide was carried out using the density functional theory method. The charge properties of Th in the $\text{ThO}_2:n\text{SiO}_2$ and $\text{Th}:n\text{SiO}_2$ compounds, where Th acts as an interstitial and substitutional impurity in cristobalite, have been studied. Geometric optimization of structures is carried out with allowance for electron-electron interactions, self-consistent distribution of electron density is investigated, and Bader effective charges are estimated.

Keywords: thorium-229, nuclear transition, silicon oxide, electron spectroscopy, density functional theory, charge density, Bader charges

УСКОРИТЕЛИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

УДК 621.384.634.539.1.07

ТЕСТОВЫЕ ПУЧКИ УСКОРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ФИАН “ПАХРА”

© 2020 г. В. И. Алексеев^a, В. А. Басков^a, В. А. Дронов^a, А. И. Львов^a, И. А. Мамонов^a, *,
В. В. Полянский^a, С. С. Сидорин^a

^aФизический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН), Москва, 119333 Россия

*E-mail: ilyha.mamonov@gmail.com

Поступила в редакцию 08.05.2020 г.

После доработки 03.08.2020 г.

Принята к публикации 03.08.2020 г.

Представлены характеристики создаваемых пучков ускорительного комплекса ФИАН “Пахра” по состоянию на ноябрь 2019 г. — выведенного электронного пучка и пучка вторичных электронов/позитронов — для тестирования и калибровок детекторов, применяемых в крупных ускорительных и астрофизических экспериментах. При энергиях 250–500 МэВ выведенного в зал № 1 из синхротрона С-25Р электронного пучка его энергетическое разрешение составляет $\delta \sim 1\%$, а интенсивность может меняться коллиматорами в диапазоне 10^3 – 10^{10} с⁻¹. Квазимонохроматический пучок вторичных электронов, созданный в зале № 2, типично имеет энергию в диапазоне 50–300 МэВ, энергетическое разрешение соответственно $\delta = 14$ – 2% , а интенсивность $\sim 10^2$ с⁻¹. Проведенное моделирование характеристик вторичного позитронного пучка позволило выбрать оптимальную геометрию установки и показало хорошее согласие с полученными затем экспериментальными данными.

Ключевые слова: электронный синхротрон, тестовые пучки, выведенный электронный пучок, вторичный электронный пучок, энергетическое разрешение, интенсивность, моделирование

DOI: 10.1134/S2079562920040016

1. ВВЕДЕНИЕ: УСКОРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ФИАН “ПАХРА” С-25Р

В экспериментальной работе по ядерной физике, физике частиц, астрофизике часто возникает необходимость в калибровке детекторов и обору-дования. Электронные и фотонные пучки средних энергий требуются и для решения ряда смежных задач, таких как исследования структуры материалов, радиационной стойкости электронных компонентов, измерения сечений ядерных процессов для гражданского и оборонного применения, и т. д. Для этих целей необходимы ускорители, генерирующие пучки.

Электронный синхротрон ФИАН С-25Р в г. Троицке (ускорительный комплекс “Пахра”) был спроектирован в середине 1960-х годов на максимальную энергию электронов 1.2 ГэВ, запущен к середине 1970-х и в основном предназначен для использования в ядерно-физических экспериментах на тормозном гамма-пучке и на выведенном (с медленным выводом) электронном пучке в энергетическом диапазоне выше порога рождения π -мезонов. В настоящее время ориентация работ изменилась, отчасти потому что реализация крупных международных проектов (астрофизическая обсерватория ГАММА-400, установки SPD, MPD и BMN проекта NICA,

эксперименты на Нуклотроне в Дубне) потребовала недорогих инструментальных средств тестирования на основе действующих ускорителей средних энергий.

Синхротрон С-25Р в настоящее время является практически единственным в России постоянно работающим ускорителем, генерирующим пучки электронов, позитронов и фотонов с энергиями до 850 МэВ. В соответствии с существующими потребностями возникла задача возродить и модернизировать когда-то существовавший магнитооптический канал выведенного высокоинтенсивного электронного пучка, а на основе тормозного фотонного пучка вновь создать менее интенсивный тестовый пучок вторичных электронов (позитронов).

Синхротрон С-25Р имеет четыре секции поворотных магнитов с прямолинейными промежутками между ними. Радиус равновесной орбиты на поворотных участках составляет 400 см, длина каждого прямолинейного промежутка 190 см. Инжектором синхротрона является микротрон с выходной энергией 7.4 МэВ. После вывода из микротрона пучок формируется электронно-оптическим трактом и при помощи магнитного инфлектора вводится в камеру синхротрона. Частота изменения магнитного поля синхротрона составляет 50 Гц. Инжекция электронов в синхро-

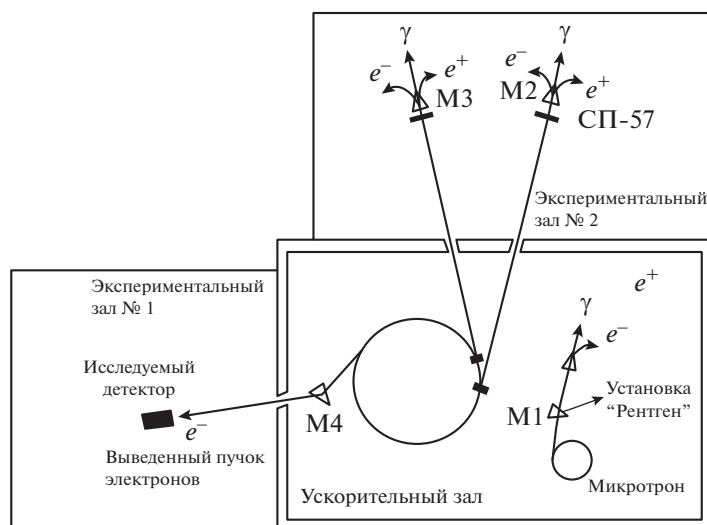


Рис. 1. Схема ускорительного комплекса ФИАН “Пахра”. М1 и М4 – поворотные магниты; М2 и М3 – спектрометрические магниты.

трон осуществляется при индукции магнитного поля в поворотных магнитах $B_i = 0.0060$ Тл. Максимальная энергия электронов достигается при $B_{\max} = 1$ Тл. Резонатор ускорителя возбуждается на частоте 55 МГц.

2. ТЕСТОВАЯ ЗОНА ЗАЛА № 1

Для тестирования детекторов и оборудования крупных современных установок была создана калибровочная (тестовая) зона в зале № 1. Созданный в 1980-е годы канал медленного вывода электронов ускорителя С-25Р [1] (рис. 1) пришлось геометрически перестроить и юстировать после установки специального компенсатора с целью уменьшения влияния краевого поля синхротрона. Главными преимуществами тестовой зоны в зале № 1 (на базе канала медленного вывода) по сравнению с описываемой ниже тестовой зоной в зале № 2 (на базе вторичного электронного или позитронного пучка) являются низкофонные условия работы экспериментальных установок, лучшее энергетическое разрешение и, при необходимости, высокие интенсивности электронного пучка.

Выведенный электронный пучок из синхротрона С-25Р формируется системой медленного вывода и протяженным (~25 м) магнитооптическим каналом (МОК).

Медленный вывод

Медленный вывод электронов с использованием резонанса радиальных бетатронных колебаний четвертого порядка ($\nu_x = 3/4$) реализован с

помощью двух полюсных обмоток ускорителя и двух выводных септум-магнитов [1]. Зазор магнитопроводов обоих септум-магнитов имеет высоту 1.2 см и ширину 3.5 см. Индукция магнитного поля в зазоре первого септум-магнита 0.08 Тл, а в зазоре второго септум-магнита достигает 0.4 Тл. Положение обоих септум-магнитов относительно центральной орбиты можно менять с помощью системы перемещения в диапазоне 0–5 см.

Магнитооптический канал (МОК)

Электронный пучок через выходное окно ускорителя (алюминиевую пластину толщиной 0.2 мм) и воздушный промежуток длиной 0.7 м вводится в тракт МОК – рис. 2. Электронный тракт МОК вакуумирован, диаметр тракта в местах нахождения линз составляет 38 мм, а в межлинзовых промежутках – 80 мм. Общая длина тракта от выходного окна ускорителя в ускорительном зале до магнита СП-57 в зале № 1 составляет ~25 м. Канал включает 4 линзы, один поворотный магнит СП-3 в зале ускорителя с размером полюса 500×200 мм² и межполюсным расстоянием 50 мм. Нужный угол поворота пучка 18.5° достигается при индукции поля магнита $B_{\text{сп-3}} \approx 0.6$ Тл для электронов с энергией $E_0 = 350$ МэВ. Контроль правильности прохождения пучка осуществляется пучковыми пропорциональными камерами, а также установленными радиаторами и видеокамерами.

Компенсатор магнитного поля (КМП)

Одним из ключевых элементов канала является устройство, предназначенное для коррекции первоначально разработанной схемы вывода, а

именно для исключения влияния на электронный пучок краевого магнитного поля магнита ускорителя — компенсатор магнитного поля (КМП). После выхода из ускорителя пучок проходит 70 см вблизи полюса магнита ускорителя, краевое переменное поле которого ($B_{\max} \sim 0.4$ Тл) сильно "растягивает" пучок в горизонтальной плоскости. При попадании пучка в КМП влияние поля прекращается, и он без искажений транспортируется к первой линзе и далее в зал № 1. КМП входит в состав вакуумного канала как его первый элемент. Основой КМП является цилиндр из нержавеющей стали, сваренный из трех труб разного диаметра, на который плотно намотан тонкий провод из мягкого отожженного железа. Входной и выходной диаметры КМП составляют 1.5 и 2.5 см соответственно. Длина устройства 110 см.

Параметры пучка

При энергии электронов $E_0 = 350$ МэВ размер пучка на выходном окне ускорителя составляет 7–10 мм как по горизонтали, так и по вертикали при интенсивности выведенного пучка $\sim 5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$. В тестовой зоне зала №1 пучок фокусируется линзой Л4 МОК на фронтальную плоскость исследуемого детектора в круглое пятно диаметром ~ 10 мм. Интенсивность пучка на выходе ускорителя определяется настройкой параметров ускорителя и системы медленного вывода. Уменьшение интенсивности в процессе транспортировки пучка определяется его "растаскиванием" рассеянным полем магнита ускорителя в промежутке между выходным окном и КМП, многократным рассеянием на воздухе в этом же промежутке и рассеянием на остаточном газе в продолжительном (до 25 м) канале транспортировки. Эти факторы в сочетании с высокой селективностью МОК уменьшают интенсивности в тестовой зоне до $5 \cdot 10^9 - 10^{10} \text{ с}^{-1}$. Таким образом, при транспортировке теряется не менее половины порядка от начальной интенсивности. Но и эту интенсивность масштаба $\sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$ приходится снижать установкой коллиматоров с отверстиями $\varnothing 2-5$ мм на тракте вывода перед линзой Л2 (перед поворотным магнитом СП-3), причем снижать до уровня $10^3 - 10^6 \text{ с}^{-1}$, удобного для целей тестирования и калибровок детекторов. Диапазон энергий выводимых электронов составляет $E_e = 200-500$ МэВ при разбросе энергий $\delta_e \sim 1\%$.

3. ТЕСТОВАЯ ЗОНА ЗАЛА № 2

В зале № 2 оборудована тестовая зона γ_1 , реализованная на базе спектрометрического магнита

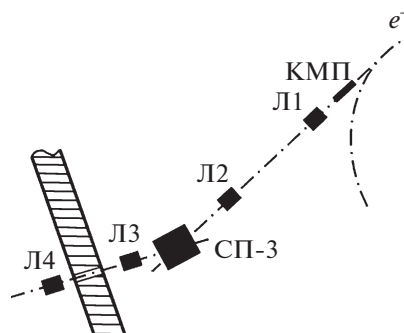


Рис. 2. Схема канала медленного вывода ускорителя С-25Р. КМП — компенсатор краевого магнитного поля; Л1–Л4 — квадрупольные линзы магнитооптического канала; СП-3 — поворотный магнит.

СП-57. Она включает: а) 40-метровый канал транспортировки пучка тормозных гамма-квантов с максимальной энергией 300–500 МэВ, сгенерированных при взаимодействиях краев банчей ускоренных электронов с внутренней вольфрамовой мишенью толщиной $0.22X_0$ в вакуумной камере синхротрона (X_0 — радиационная длина) [2], и б) пучок вторичных электронов (или позитронов) с диапазоном энергий $E_e = 30-300$ МэВ при энергетическом разрешении $\delta = \Delta E_e / E_e = 14-2\%$, соответственно (рис. 3) [3, 4]. Интенсивность вторичного пучка электронов (позитронов) при коллиматоре C_3 в свинцовой защите $\varnothing 30$ мм составляет около 10^2 с^{-1} .

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПУЧКА ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ (ПОЗИТРОНОВ)

Перед окончательным монтажом тестового канала γ_1 ускорителя "Пахра" было проведено моделирование характеристик вторичного пучка позитронов, формируемого системой "фотонный пучок—конвертер—магнит—коллиматор". Численные расчеты проводились на базе пакета GEANT4 версии 10.0 с включением моделей основных физических процессов, соответствующих одному из стандартных наборов — Physics List QGSP_BERT. Главная цель моделирования состояла в определении оптимальной геометрии установки и в оценке ожидаемого энергетического разброса частиц во вторичном пучке с учетом конечного размера исходного фотонного пучка, конвертера, коллиматора, краевого магнитного поля, рассеяния в конвертере и в воздухе.

На рис. 4а приведено в проекции на медианную плоскость магнита СП-57 распределение потока позитронов. Результаты получены для медленного конвертера $0.5 \times 5 \times 0.1 \text{ см}^3$ (2), расположен-

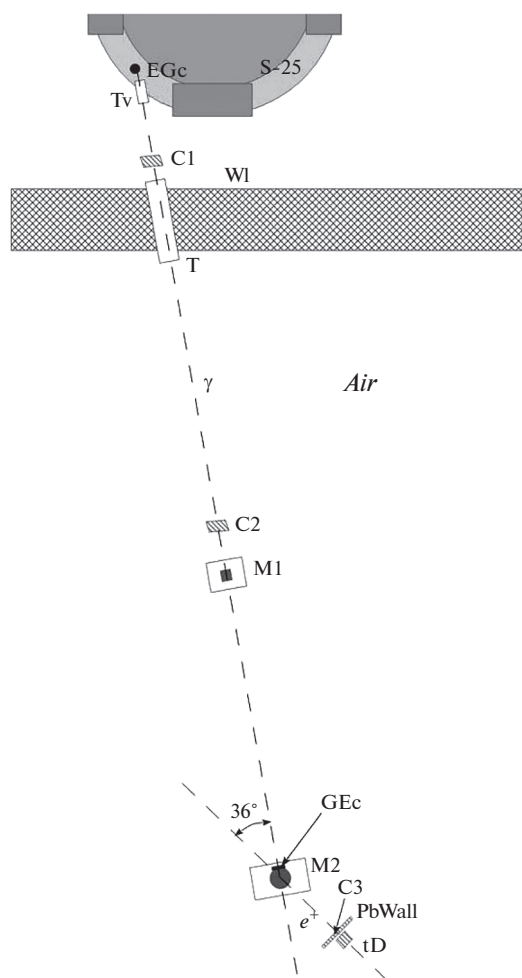


Рис. 3. Схема тестового канала γ_1 ускорителя “Пахра”: EGc — внутренняя вольфрамовая мишень; Tv — вакуумный вывод с алюминиевым окошком толщиной 0.2 мм; C1 — первый коллиматор канала γ_1 с выходным диаметром 13 мм; W1 — железобетонная стена ускорительного зала толщина ~3 м; T — выход канала γ_1 в зал № 2 (стальная труба диаметром ~16 см); C2 — второй коллиматор канала типа “скрайбер” (выходной диаметр 3 см); M1 — очищающий магнит СП-03; GEc — медный конвертер $0.5 \times 5 \times 0.1$ см на срезе полюсов магнита M2; M2 — спектрометрический магнит СП-57 (центр магнита расположен на расстоянии ~40 м от внутренней мишени канала γ_1); C3 — коллиматор левого плеча тестового канала ($\varnothing$ 3–30 мм); PbWall — защитная свинцовая стенка левого плеча тестового канала (толщина 10 см, диаметр коллиматора в стенке 3–30 мм); tD — место расположения исследуемого детектора.

ного на срезе полюсов магнита (3) на траектории фотонного пучка, проходящего на рисунке снизу вверх. Величина индукции магнитного поля в центре межполюсного зазора шириной 6 см составляла 0.75 Тл, начало спада поля находилось в 6 см от среза внутрь, постоянная спада поля 6.7 см. Осевая линия коллиматора левой (5) защитной свинцовой стенки размера $150 \times 150 \times 10$ см³ со-

ставляла угол 36° с осью первичного фотонного пучка. Расчет проводился с введением технической цилиндрической области $\varnothing$ 600 см и высотой 30 см ((7) на рис. 4а), за пределами которой (исключая область коллиматора) частицы не прослеживались (попадали в “черную дыру”).

На рис. 4б показан результат численного моделирования зависимости от энергии позитронов угла их вылета θ и интенсивности позитронного пучка от индукции магнитного поля в центре магнита $B_{\max} = 0.1, 0.2, 0.25, 0.5, 0.75$ Тл. Рисунок показывает, что при указанных выше параметрах коллиматора через него проходят позитроны с энергиями до ~300 МэВ. Интенсивность пучка позитронов с энергиями, лежащими в диапазоне от ~50 до ~130 МэВ, оказывается максимальной, что в дальнейшем было подтверждено прямыми измерениями.

С помощью GEANT4 было также выполнено моделирование прохождения позитронов от точки рождения в медном конвертере толщиной 1 мм через $\varnothing$ 10 мм коллиматор до места расположения исследуемых детекторов при полях в магните в широком диапазоне величин $B_{\max}$ (рис. 5). Рассчитанная зависимость величины энергии позитронов, прошедших коллиматор, и экспериментально измеренная зависимость той же энергии совпали в пределах ~3% [4], что указывает на достоверность используемой в расчетах приближенной карты магнитного поля.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены характеристики тестовых γ и $e^\pm$ пучков ускорительного комплекса ФИАН “Пахра”. Пучки предназначены для проведения калибровок детекторов, применяемых в крупных современных ускорительных и астрофизических экспериментах.

Канал медленного вывода электронов в зал № 1 дает электронный пучок с: максимальной интенсивностью до $\sim 10^{10}$ с⁻¹. Применение дополнительной коллимации на магнитооптическом тракте позволяет снизить интенсивность пучка до более удобного уровня 10^3 – 10^6 с⁻¹. При этом диапазон энергий электронов, выводимых из ускорителя, составляет 250–500 МэВ при энергетическом разрешении электронного пучка $\delta \sim 1\%$.

Низкоинтенсивный квазимонохроматический пучок вторичных электронов (позитронов) в зале № 2 имеет следующие основные характеристики: диапазон энергий электронов (позитронов) от 30 до 300 МэВ при соответствующем энергетическом разбросе $\delta = \Delta E/E = 14$ –2%. Интенсивность вторичного пучка электронов (позитронов) в слу-

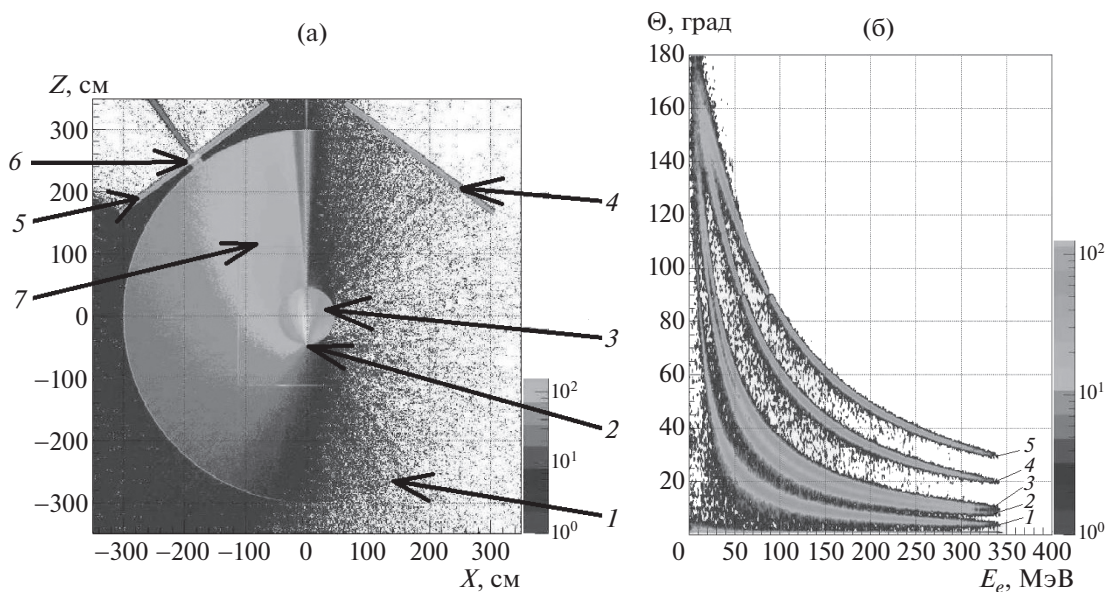


Рис. 4. Результаты моделирования с помощью GEANT4 генерации вторичного пучка позитронов на конвертере магнита СП-57. (а) Вид сверху на медианную плоскость магнита: 1 – технический цилиндр, вне которого частицы не прослеживаются; 2 – конвертер, устанавливаемый на краю полюса магнита (маленького круга в центре); 3 – полюс магнита СП-57; 4, 5 – правая и левая свинцовые защитные стенки; 6 – коллиматор и поток отобранных частиц; 7 (светлая область) – основной поток позитронов. (б) Угол вылета позитрона Θ в зависимости от энергии рожденной частицы E_e при нескольких значениях индукции в центре магнита B_{max} : 1 – 0.1, 2 – 0.2, 3 – 0.25, 4 – 0.5, 5 – 0.75 Тл.

чае использования $\varnothing 30$ мм коллиматора в свинцовой защите составляет около 10^2 с $^{-1}$.

Моделирование генерации вторичного позитронного пучка тормозным фотонным пучком по-

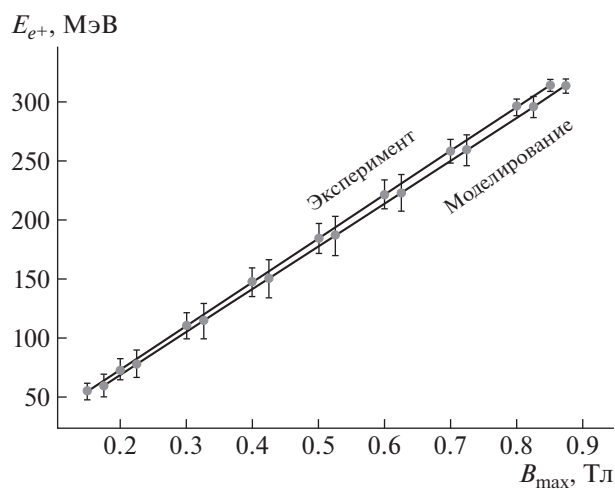


Рис. 5. Результаты моделирования с помощью GEANT4 энергии пучка позитронов, а также средней энергии позитронов, определенной экспериментально, в зависимости от максимального значения поля магнита СП-57.

казало, что в диапазоне значений индукции магнитного поля 0.1–0.75 Тл в центре магнита в $\varnothing 30$ мм коллиматор, расположенный в свинцовой защите под углом 36° относительно траектории фотонного пучка, проходят позитроны с энергией до ~ 300 МэВ. Определено, что максимум интенсивности позитронов лежит в диапазоне энергий ~ 50 – 130 МэВ, что в дальнейшем было подтверждено прямыми измерениями. Рассчитанная зависимость величины энергии позитронов, прошедших коллиматор, совпала с экспериментальной зависимостью в пределах $\sim 3\%$, что подтвердило надежность моделирования.

В дальнейшем моделирование предполагается продолжить и изучить в частности вопрос о целесообразности установки гелиевых мешков для устранения рассеяния частиц в воздухе и уменьшения их энергетического разброса после прохождения коллиматора.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа поддержана грантами РФФИ-NICA № 18-02-40061 и № 18-02-40079 и доложена на конференции МКТЭФ (ноябрь 2019 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Башмаков Ю.А., Карпов В.А., Яров А.С. // ЖТФ. 1984. Т. 54. № 5. С. 905–911.
2. Бессонов Е.Г., Малиновский Е.И., Субботин Г.Г. // Препринт ФИАН № 28. 2006. Москва: ФИАН.
3. Карпов В.А., Серов А.В. // Краткие сообщения по физике. 2007. № 9. С. 15–20.
4. Алексеев В.И., Басков В.А., Дронов В.А., Львов А.И., Кречетов Ю.Ф., Малиновский Е.И., Павлюченко Л.Н., Полянский В.В., Сидорин С.С. // ПТЭ. 2019. №2. С. 5–11.

Test Beams of the LPI Accelerator Complex “Pakhra”

V. I. Alekseev¹, V. A. Baskov¹, V. A. Dronov¹, A. I. L'vov¹, I. A. Mamonov¹, *,
V. V. Polyanskiy¹, and S. S. Sidorin¹

¹Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences (LPI), Moscow, 119333 Russia

*e-mail: ilyha.mamonov@gmail.com

Received May 8, 2020; revised August 3, 2020; accepted August 3, 2020

Abstract—In this paper, we report the characteristics of the generated beams, the extracted electron beam and the beam of secondary electrons/positrons, of the LPI accelerator complex Pakhra as of November 2019 for testing and calibrating detectors used in large accelerator and astrophysical experiments. At energies of 250–500 MeV of the electron beam ejected into Hall 1 from the S-25R synchrotron, its energy resolution is $\delta \sim 1\%$ and the intensity can be changed by collimators in the range of 10^3 – 10^{10} s^{-1} . The quasi-monochromatic beam of secondary electrons produced in Hall 2 typically has an energy in the range of 50–300 MeV, a corresponding energy resolution of $\delta = 14$ – 2% , and an intensity of $\sim 10^2 \text{ s}^{-1}$. The performed simulation of the characteristics of the secondary positron beam allowed selecting the optimal geometry of the setup and showed good agreement with the experimental data obtained later.

Keywords: electron synchrotron, test beams, extracted electron beam, secondary electron beam, energy resolution, intensity, simulations

УСКОРИТЕЛИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

УДК 621.384.663

ВАРИАНТ ТРАКТА ТРАНСПОРТИРОВКИ ПРОТОННОГО ПУЧКА ДЛЯ ОНКООФТАЛЬМОЛОГИЧЕСКОГО ЦЕНТРА ПЛТ В НИЦ “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ” – ПИЯФ

© 2020 г. С. А. Артамонов^а, Е. М. Иванов^а, Г. А. Рябов^а, В. А. Тонких^{а, *}, Д. А. Амерканов^а

^а Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра
“Курчатовский институт”, Гатчина, 188300 Россия

*e-mail: tonkikh_va@pnpi.nrcki.ru

Поступила в редакцию 08.05.2020 г.

После доработки 04.08.2020 г.

Принята к публикации 04.08.2020 г.

Исследован вариант тракта транспортировки протонного пучка с энергией 60 МэВ для будущего онкоофтальмологического центра протонной лучевой терапии на изохронном циклотроне Ц-80 в ПИЯФ. Тракт при этом должен удовлетворять целому набору требований. На основе серии расчетов определены оптимальные параметры и состав элементов тракта. Показано, что такой тракт позволяет попеременно и оперативно переходить с режима наработки изотопов на циклотроне к режиму работы центра протонной лучевой терапии без кардинальной перестройки систем ускорителя.

Ключевые слова: изохронный циклотрон, офтальмологический центр, транспортировка пучка

DOI: 10.1134/S2079562920040028

ВВЕДЕНИЕ

Изохронный циклотрон Ц-80 является многоцелевой машиной. Он предназначен для производства медицинских изотопов высокого качества (например, генераторных изотопов), создания центра для лечения меланомы глаза и проведения испыта-

ний электроники для авиации и космоса на радиационную стойкость [1]. Сейчас на циклотроне дополнительно разрабатывается новый способ получения сверхчистых изотопов с помощью магнитного сепаратора.

Общий вид циклотрона представлен на рис. 1.



Рис. 1. Общий вид циклотрона Ц-80.

Таблица 1

Магнитная структура	
Диаметр полюса	2.05 м
Зазор в долине	386 мм
Зазор в холме	163 мм
Магнитное поле в центре	1.352 Тл
Флаттер (макс.)	0.025
Угол спиральности (макс.)	65°
Число секторов	4
Ток выведенного пучка	до 100 мкА
Радиус вывода пучка	0.65–0.90
Энергия (варьируемая)	40–80 МэВ
Метод вывода пучка	стриппирование

Основные параметры циклотрона, представлены в табл. 1. Согласно приведенным в таблице параметрам циклотрон Ц-80 может быть использован как для производства целого спектра медицинских изотопов, так и для создания офтальмологического центра (ОФЦ) по лечению раковых заболеваний глаза.

Однако при реализации совместной работы циклотрона на производство изотопов и офтальмологию возникают некоторые проблемы. Дело в том, что для производства изотопов требуется пучок с высокой интенсивностью ~ 100 мкА ($6 \cdot 10^{14}$ с⁻¹) и выше, а для офтальмологии необходим пучок всего $\leq 10^{10}$ с⁻¹. Одновременный вывод двух таких пучков, с указанными выше параметрами, из циклотрона Ц-80 оказался весьма сложной технической и физической задачей, требующей существенных переделок уже запущенной машины. Основные детали этой проблемы рассмотрены в работе [2].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В данной работе обсуждается другой — относительно простой, дешевый и радиационно более чистый вариант тракта для офтальмологии, позволяющего оперативно переходить с одного режима работы циклотрона на другой без кардинальной перестройки систем ускорителя. То есть, вывод пучка производится попеременно: либо для наработки изотопов, либо для работы ОФЦ. Такой режим работы вполне допустим, т.к. для производства изотопов важен интеграл облучения, поэтому остановки в облучении изотопов, без нарушения режима настройки ускорителя, не являются катастрофичными.

Для проектируемого офтальмологического тракта были сформулированы следующие требования. Энергия пучка протонов в тракте офтальмологии должна быть 60 МэВ, поперечный размер пучка в конце канала, т.е., на входе в зал протонно лучевой терапии, должен быть ≥ 20 мм в диаметре, его расходимость не более 5 мрад (малый эмиттанс пучка). При этом необходимо осуществить подъем пучка с 1250 до 1750 мм, т.е., на 0.5 м по вертикали, снизив интенсивность исходного пучка до 10^9 частиц см⁻² с⁻¹. Найти возможность обеспечить быструю перестройку пучка от режима наработки изотопов с интенсивностью 100 мкА к режиму офтальмологии без кардинальной перестройки систем ускорителя. Реализовать минимальные потери пучка в зале ускорителя.

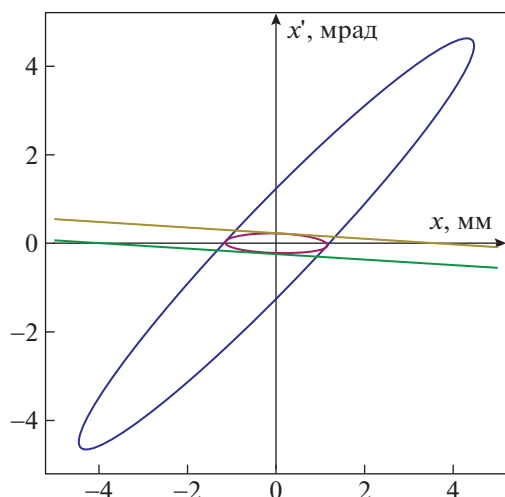
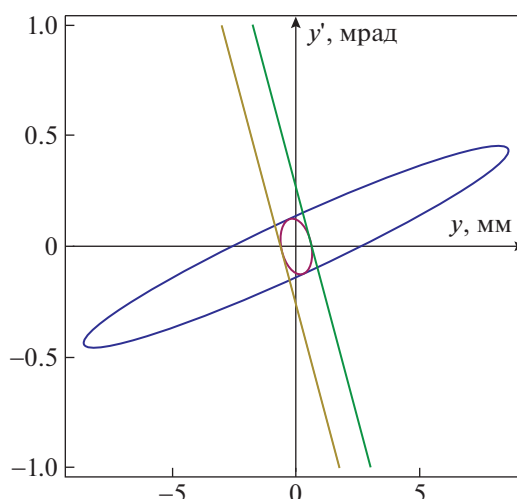
МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ПОСТАВЛЕННОЙ ЗАДАЧИ

Для проектирования системы транспортировки пучка к экспериментальным установкам необходимо знать фазовые эллипсы пучка на выходе из выводной системы ускорителя. В линейном приближении движение частиц пучка в вертикальной (y) и горизонтальной (x) плоскости является независимым. В этом приближении состояние такого ансамбля частиц может быть описано с помощью двух независимых фазовых эллипсов [3].

В качестве начального фазового эллипса в вертикальной плоскости был выбран согласованный с фокусирующей структурой циклотрона фазовый эллипс пучка на радиусе и азимуте перезарядного устройства и с максимальным отклонением от медианной плоскости 3 мм [4]. Отклонение 3 мм в точке максимума огибающей определяет величину эмиттанса в диапазоне ~ 1 –4 мм мрад.

Начальные условия для горизонтального движения определялись более сложно. Это связано с механизмом заброса пучка на мишень в процессе ускорения. Из-за малой величины заброса пучка на мишень (несколько миллиметров) на перезарядном пробнике образуется источник с почти точечными размерами. Исходя из опыта работы на других циклотронах принято считать, что центр заброса пучка отстоит от края перезарядного устройства на 1.5 мм. Расходимость пучка определялась максимальной расходимостью эллипса, согласованного с фокусирующей структурой циклотрона в горизонтальной плоскости. Детали описаны в предыдущей работе [4].

Оптика пучка рассчитывалась с помощью широко применяемой в мире программы Trase-3D [5]. Однако программа не рассчитана на использование ограничивающих апертур или коллиматоров в тракте. Поэтому был применен искусственный прием. Влияние коллиматора на фазовый портрет пучка учитывалось следующим образом.

Рис. 2. Горизонтальный $x-x'$.Рис. 3. Вертикальный эллипс $y-y'$.

На x и y фазовые эллипсы пучка при входе в тракт транспортировки накладывался аксептанс коллиматора. Аксептанс представляет собой две прямые линии, являющиеся отображением с помощью матрицы перехода апертуры коллиматора $x, y \leq 3$ мм, на вход тракта.

Согласно работе [3]:

$$\mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{X}_0,$$

$$\text{где } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{33} & M_{34} \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix}, \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x \\ x' \\ y \\ y' \end{pmatrix}, \mathbf{X}_0 - \text{ко-}$$

ординаты и углы движения частицы на входе тракта.

Очевидно, что сквозь коллиматор пройдут частицы, координаты которых удовлетворяют соотношениям

$$|x| = |M_{11}x_0 + M_{12}x'_0| \leq A,$$

$$|y| = |M_{33}y_0 + M_{34}y'_0| \leq A.$$

Здесь $|M_{11}x_0 + M_{12}x'_0| = A$ и $|M_{33}y_0 + M_{34}y'_0| = A$ — соответственно параллельные прямые в фазовом пространстве пучка $x-x'$ и $y-y'$, являющиеся отображением аксептанса коллиматора на вход тракта.

Далее в часть фазового пространства, ограниченного входными эллипсами пучка (вертикальным и горизонтальным на выходе согласующего магнита [4]) и прямыми отраженного коллиматора, вписывался новый эллипс (это позволяет

остаться в формализме TRACE-3D, работающего с эллипсами пучков).

Такая процедура позволяет найти эллипс и эмитанс эллипсу пучка, проходящему без потерь через тракт и коллиматор. Отношение площади вписанного фазового эллипса к площади первоначального эллипса определяет коэффициент уменьшения интенсивности.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Окончательный вариант нового, оптимизированного по программе Trace-3D, тракта представлен на рис. 4.

На рис. 5 представлен PrintScreen результата работы программы Trace-3D по оптимизации предложенного тракта транспортировки. Сверху — оптимальные значения градиентов магнитных полей квадрупольных линз. В нижней части рис. 5 верхняя линия соответствует горизонтальной (по отношению к средней линии), а нижняя — вертикальной огибающей пучка.

В результате дополнительных исследований было выявлено, что для уменьшения интенсивности пучка в новом тракте на пять порядков нужно: во-первых, выключить фокусирующие соленоиды в системе аксиальной инжекции (САИ) циклотрона. Это позволит уменьшить интенсивность пучка в ~ 1000 раз без увеличения радиационной нагрузки на системы ускорителя, т.к. энергия инжектируемых в Ц-80 отрицательных ионов водорода всего 26 кэВ. Во-вторых, оставшуюся ~ 0.1 мкА ($6 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$) избыточную интенсивность, можно уменьшить ~ 100 раз за счет введения в новый тракт транспортировки пучка коллиматора К2 размером 6 мм $\times$ 6 мм.

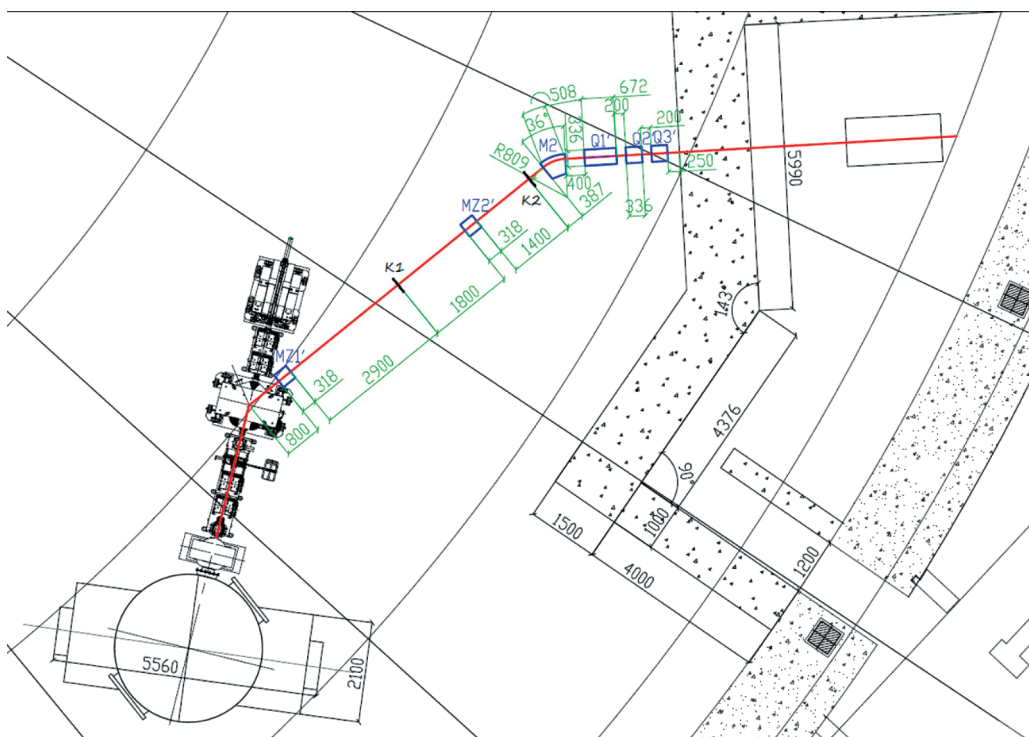


Рис. 4. Оптимизированный тракт транспортировки пучка для офтальмологических нужд. Здесь MZ1, MZ2 – поворотные магниты в вертикальной плоскости; M1, M2 – поворотные магниты в горизонтальной плоскости; K1, K2 – коллиматоры; Q1, Q2, Q3 – триплет квадрупольных линз.

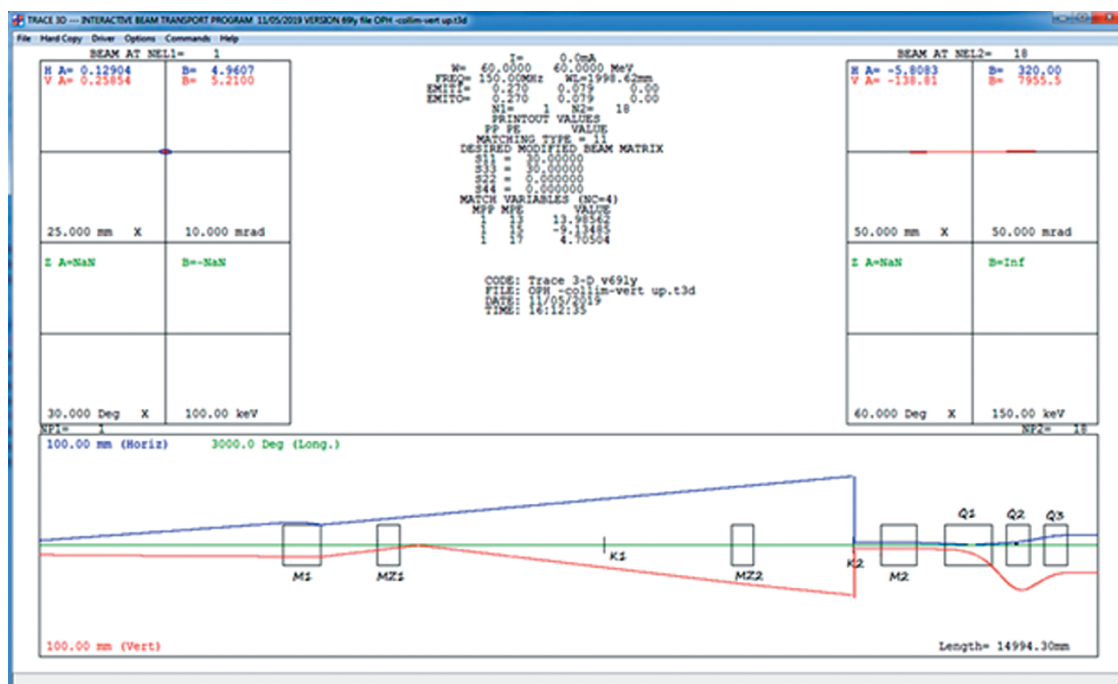


Рис. 5. Результаты оптимизационного расчета Trace-3D и огибающие пучка.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный вариант тракта удовлетворяет всем сформулированным выше требованиям, а также является простой, дешевой, радиационно-чистой, с минимальным числом элементов схемой. Т.к. для производства изотопов важен интеграл облучения, то переключение пучка на некоторое время в режим для офтальмологических нужд, отключив только солениды в системе аксиальной инжекции и переключив поворотный магнит, не является проблемой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Artamonov S.A., Amerkanov D.A., Ivanov E.M. et al. // Proc. RUPAC2018 Conf. Protvino, Russia. 2018. P. 65–67.
2. Artamonov S.A., Ivanov E.M., Riabov G.A., Tonkikh V.A. // Proc. OPENSOURCE Conf. 2018. Gatchina, Russia. 2018. P. 1.
3. Steffen K.G. High Energy Beam Optics. 1965. New York-London-Sydney: Interscience Publ.
4. Artamonov S.A., Chernov A.N., Ivanov E.M., Riabov G.A., Tonkikh V.A. // Proc. RUPAC2016 Conf. St-Petersburg, Russia. 2016. P. 176–178.
5. Crandall K., Rusthoi D. "TRACE 3-D Documentation," 3rd Ed., LA-UR-97-886. 1997.

Variant of the Protons Beam Delivery System for the Oncological Ophthalmological Center of Proton Radiation Therapy at the NRC "Kurchatov Institute"—PNPI

S. A. Artamonov¹, E. M. Ivanov¹, G. A. Riabov¹, V. A. Tonkikh^{1, *}, and D. A. Amerkanov¹

¹Petersburg Institute of Nuclear Physics, National Research Center "Kurchatov Institute", Gatchina, 188300 Russia

*e-mail: tonkikh_va@pnpi.nrcki.ru

Received May 8, 2020; revised August 4, 2020; accepted August 4, 2020

Abstract—A variant of the protons beam delivery system with an energy of 60 MeV for the future oncoophthalmological center for proton radiation therapy at the isochronous cyclotron C-80 at PNPI was designed. The requirements to the beam characteristics were defined. Based on a series of calculations, the optimal parameters and composition of the beam line elements are determined. It is shown that such a beam line allows one to alternately and efficiently switch from the isotope production mode on the cyclotron to the mode of operation of the center of proton radiation therapy without a fundamental overhaul of the accelerator systems.

Keywords: isochronous cyclotron, ophthalmological center, beam transportation

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ, ПУЧКОВ ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

УДК 539.12, 539.1.05

ДОЛГОЖИВУЩИЕ ЗАРЯЖЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ В УЛЬТРАПЕРИФЕРИЧЕСКИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ НА LHC

© 2020 г. Е. В. Жемчугов^{a, b, *}

^aИнститут теоретической и экспериментальной физики имени А.И. Алиханова Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Москва, 117218 Россия

^bНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

*E-mail: zhemchugov@itep.ru

Поступила в редакцию 08.05.2020 г.

После доработки 31.07.2020 г.

Принята к публикации 31.07.2020 г.

Рассматривается рождение долгоживущих заряженных частиц с массой порядка 100 ГэВ в ультрапериферических столкновениях протонов или тяжелых ионов на Большом адронном коллайдере (БАК). Предлагается новый метод поиска таких частиц с использованием передних детекторов коллабораций ATLAS и CMS. Оцениваются массы и времена жизни долгоживущих заряженных частиц, на которые таким образом можно поставить модельно независимые ограничения, исходя из текущих данных БАК.

DOI: 10.1134/S2079562920040193

1. ВВЕДЕНИЕ

Заметную долю столкновений на Большом адронном коллайдере (БАК) составляют так называемые ультрапериферические столкновения. Это столкновения, в которых частицы проходят на некотором расстоянии друг от друга; сталкиваются при этом электромагнитные поля этих частиц. Частицы остаются целыми, и их можно зарегистрировать в специальных передних детекторах. Фотоны электромагнитного поля ультрарелятивистской частицы почти реальные, поэтому ультрапериферические столкновения можно рассматривать как столкновения двух реальных фотонов, распределенных по некоторому спектру. В этом смысле БАК работает как фотон-фотонный коллайдер. В ультрапериферических столкновениях можно искать Новую физику, которая может проявиться в результате слияния фотонов.

Одним из вариантов проявления Новой физики может стать рождение долгоживущих заряженных частиц — частиц, у которых время жизни достаточно велико, чтобы они могли вылететь из детектора и распасться за его пределами. Экспериментальные коллаборации ведут поиск таких частиц (см., например, [1–3]), и поставлен ряд ограничений на их массы, но все эти ограничения модельно зависимы. Дело в том, что сечение рождения долгоживущих частиц в адронных взаимодействиях зависит от модельных параметров, описывающих взаимодействие этих новых частиц с W - и Z -бозонами, либо с некими новыми бозо-

нами модели. Однако взаимодействие частиц с фотонами зависит только от электрического заряда частицы. Поэтому ультрапериферические столкновения на БАК позволяют вести поиск долгоживущих заряженных частиц в пространстве всего двух параметров: заряд и масса частицы.

В данной работе рассматривается рождение новых заряженных частиц с массой порядка 100 ГэВ в ультрапериферических столкновениях протонов с энергией 13 ТэВ или ионов свинца с энергией 5.02 ТэВ/(пара нуклонов) и предлагается метод поиска таких частиц с использованием передних детекторов коллабораций ATLAS и CMS. Особенностью метода является то, что в нем нет необходимости измерять потери энергии частиц на ионизацию или времена их пролета через детектор, поэтому он может использоваться как дополнительный к традиционным методам поиска.

2. СЕЧЕНИЯ РОЖДЕНИЯ

Одна из двух диаграмм Фейнмана, описывающих рождение пары долгоживущих заряженных частиц $\chi^\pm$ в ультрапериферическом столкновении протонов или ионов свинца в лидирующем приближении теории возмущений, представлена на рис. 1а. Согласно приближению эквивалентных фотонов (см. обзоры [4, 5]), фотоны в пропагаторах реальные и распределены по спектру

$$n(\omega) = \frac{Z^2 \alpha}{\pi^2 \omega} \int \frac{\mathbf{q}_\perp^2 F^2(\mathbf{q}_\perp^2 + (\omega/\gamma)^2)}{(\mathbf{q}_\perp^2 + (\omega/\gamma)^2)^2} d^2 q_\perp, \quad (1)$$

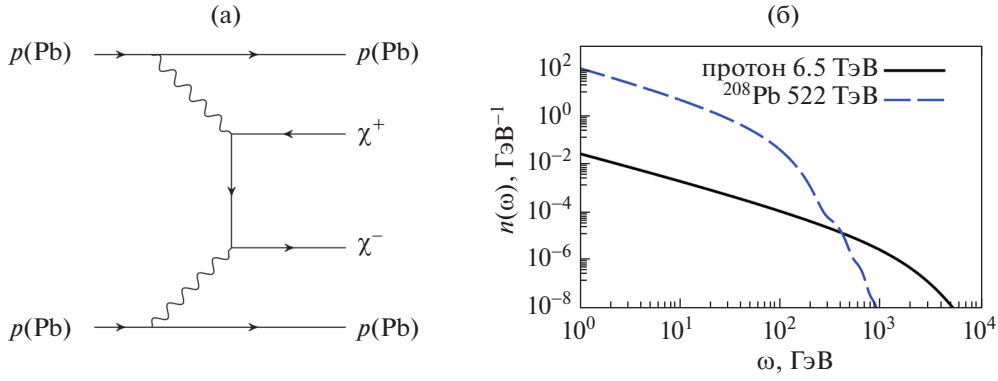


Рис. 1. (а) Рождение пары заряженных частиц в ультрапериферическом столкновении. (б) Спектры эквивалентных фотонов для протона с энергией 6.5 ТэВ и для ^{208}Pb с энергией 522 ТэВ.

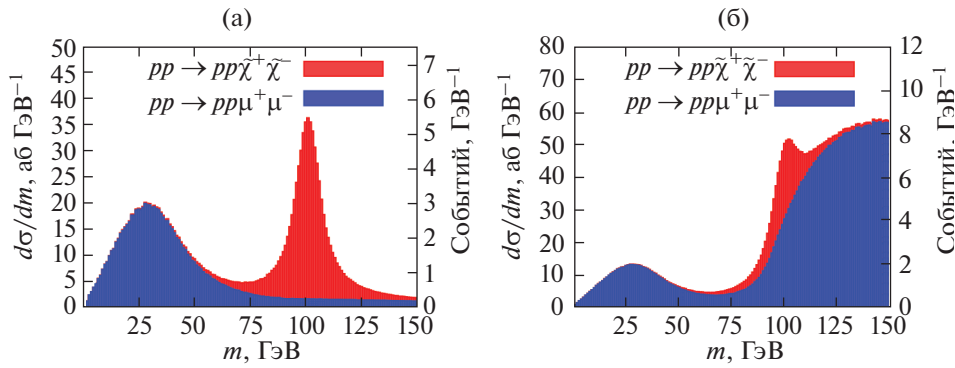


Рис. 2. Результаты моделирования распределения массы m (4) с учетом фона от процесса $pp \rightarrow pp\mu^+\mu^-$. Здесь и далее масса заряженных частиц принята равной $m_\chi = 100$ ГэВ, интегральная светимость – 150 фб^{-1} : (а) без учета множественности столкновений (pile-up); (б) считая, что в среднем происходит 50 столкновений одновременно.

где ω – энергия фотона, $\mathbf{q}_\perp$ – его поперечный импульс, Ze – заряд частицы-источника фотонов, F – ее электромагнитный форм-фактор, γ – ее фактор Лоренца, $\alpha = e^2/4\pi$ – постоянная тонкой структуры. Сечение этого процесса можно рассчитать по формуле

$$\sigma(pp \rightarrow pp\chi^+\chi^-) = \int_0^\infty \int_0^\infty \sigma(\gamma\gamma \rightarrow \chi^+\chi^-) n(\omega_1) n(\omega_2) d\omega_1 d\omega_2, \quad (2)$$

где $\sigma(\gamma\gamma \rightarrow \chi^+\chi^-)$ – сечение рождения пары заряженных частиц при столкновении реальных фотонов (сечение Брейта–Уилера [6]).

Спектры эквивалентных фотонов протона и ^{208}Pb для текущих энергий БАК представлены на рис. 1б. Благодаря большому электрическому заряду, ^{208}Pb дает больше фотонов, но меньшая энергия связи ядра приводит к тому, что форм-

фактор раньше обрезает спектр на высоких энергиях.

Сечения рождения частиц с массой $m_\chi = 100$ ГэВ [7]

$$\begin{aligned} \sigma(pp \rightarrow pp\chi^+\chi^-) &\approx 2.84 \text{ фб}, \\ \sigma(\text{Pb Pb} \rightarrow \text{Pb Pb}\chi^+\chi^-) &\approx 21.2 \text{ пкб}, \end{aligned} \quad (3)$$

где энергия столкновения протонов принята равной 13 ТэВ, энергия столкновения тяжелых ионов – 5.02 ТэВ/(пара нуклонов). Падение числа эквивалентных фотонов с ростом их энергии приводит к быстрому падению сечения рождения с ростом массы частиц, и для $m_\chi = 250$ ГэВ сечение рождения в столкновениях протонов будет около 0.1 фб, в столкновениях ионов – порядка 1 фб [7]. Интегральная светимость БАК в столкновениях тяжелых ионов сейчас составляет 2.5 нб^{-1} [8, 9] – это слишком мало, чтобы ожидать даже одно событие рождения пары частиц с

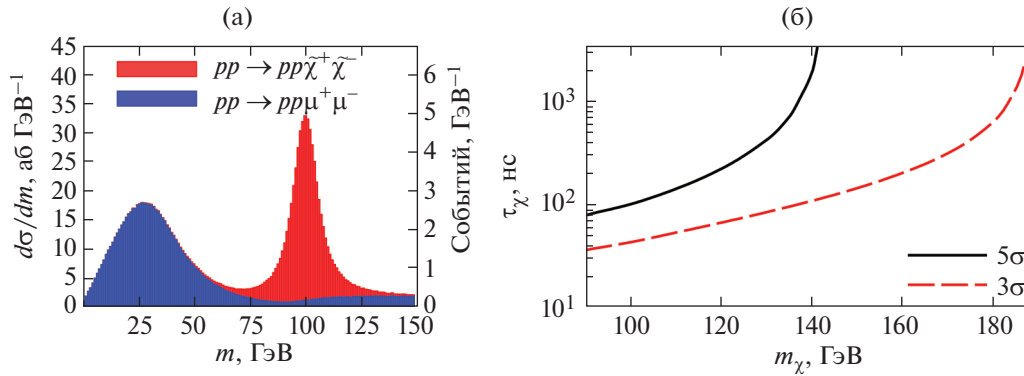


Рис. 3. (а) Распределение массы m (4) с учетом множественности столкновений (50 столкновений протонов одновременно) и с требованием сохранения полного продольного импульса системы (5). (б) Область параметров (m_χ, τ) , доступная для исследований с текущей интегральной светимостью БАК (150 фб^{-1}). В области выше кривой 3σ (5σ) можно найти пик в распределении m (4), выступающий на 3 (5) стандартных отклонений над фоном (считая, что в среднем происходит 50 столкновений протонов одновременно).

$m_\chi \sim 100 \text{ ГэВ}$. Интегральная светимость в столкновениях протонов составляет 150 фб^{-1} , и здесь является доступной область масс $m_\chi \lesssim 250 \text{ ГэВ}$.

3. МЕТОД ПОИСКА

Обычно долгоживущие заряженные частицы ищутся по их способности ионизировать вещество, либо по их скорости пролета через детектор. Ультрапериферические столкновения позволяют предложить еще один способ. Дело в том, что в конечном состоянии процесса рождения пары заряженных частиц в ультрапериферическом столкновении есть всего четыре частицы: две исходные столкнувшиеся и две новые родившиеся. Исходные частицы можно зарегистрировать в переднем детекторе и таким образом измерить их энергии после столкновения E_1 и E_2 . Импульсы новых частиц $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ измеряются по искривлению их траекторий в трековом детекторе. В результате можно полностью восстановить кинематику столкновения. Массу новых частиц можно вычислить по формуле [7]:

$$m = \sqrt{\frac{(2E_1E_2 + \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)^2 - \mathbf{p}_1^2\mathbf{p}_2^2}{4E_1E_2 + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2}}. \quad (4)$$

Измеряя m в каждом событии, получим некоторое распределение. Это распределение будет иметь пик около $m = m_\chi$, размытый разрешением детектора. Единственная известная частица, которая может пройти детектор насквозь, — это мюон, поэтому должен наблюдаться аналогичный пик около $m = m_\mu$.¹ Результат моделирования такого измерения представлен на рис. 2а [7].

Более существенным источником фона в данном измерении будет наложение нескольких одновременных событий (pile-up). Во время работы

БАК в 2015–2018 гг. происходило до 70 столкновений протонов одновременно. Может случиться так, что в одном из этих столкновений родится пара мюонов, а в двух других уцелеет по одному протону, потерявшему достаточно энергии, чтобы попасть в передний детектор. Учет таких событий приводит к заметному росту фона в сигнальной области, как это видно на рис. 2б [7]. Причина заключается в том, что число эквивалентных фотонов быстро растет с уменьшением их энергии, поэтому рождение пары мюонов гораздо вероятнее рождения пары частиц с массой 100 ГэВ. На рис. 2а этот эффект был подавлен требованием, чтобы оба протона попадали в передний детектор: если на рождение пары частиц уходило меньше $\approx 200 \text{ ГэВ}$ энергии [7], то протоны пролетали мимо. В случае множественности столкновений, один или оба протона могут прилететь из других событий.

Благодаря тому, что в ультрапериферических столкновениях полностью восстанавливается кинематика события, убрать фон от множественности столкновений довольно просто: достаточно потребовать сохранения полного продольного импульса системы:

$$|p_{\parallel,1} + p_{\parallel,2} + E_1 - E_2| < \hat{p}_\parallel, \quad (5)$$

где $p_{\parallel,1}$, $p_{\parallel,2}$, E_1 , $-E_2$ — продольные компоненты импульсов χ^+ , χ^- и протонов, а $\hat{p}_\parallel$ — параметр обреза. Распределение m для $\hat{p}_\parallel = 20 \text{ ГэВ}$ представлено на рис. 3а.

Можно ослабить требование к времени жизни частицы: пусть теперь частица живет лишь доста-

¹ Поскольку m_μ много меньше разрешения детектора, а m не может быть меньше нуля, в пике от мюонов половина событий будет отброшена (мнимое m), а сам пик будет смещен в сторону больших масс.

точно долго, чтобы пролететь часть детектора и распасться где-то внутри. В эксперименте это будет выглядеть как трек от заряженной частицы, который в какой-то точке обрывается или изламывается. К примеру, если долгоживущая частица — это легчайшее чарджино минимальной суперсимметричной модели $\tilde{\chi}_1^\pm$, то оно может распасться по каналу $\tilde{\chi}_1^\pm \rightarrow \tilde{\chi}_1^0 \pi^\pm$, где $\tilde{\chi}_1^0$ — легчайшее нейтралино. Долгоживущим чарджино может быть только если разность масс чарджино и нейтралино невелика, так что родившийся пион будет иметь низкую энергию и будет быстро поглощен веществом детектора. В проводившихся до сих пор поисках подобных пропадающих треков рассматривалось рождение чарджино в адронных процессах, поэтому требовалось наличие адронных струй в конечных состояниях [10, 11]; в ультрапериферических столкновениях таких струй не будет.

Хотя поиск пропадающих (или изламывающихся) треков сам по себе является интересной задачей, будем просто отбрасывать события, в которых треки не проходят сквозь мюонную систему. Тогда можно оценить, какая область параметров (m_χ, τ) , где τ — время жизни заряженной частицы, доступна для исследований с текущими данными БАК. Эта область приведена на рис. 3б [7].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Ультрапериферические столкновения позволяют проводить поиск новых заряженных частиц модельно независимым образом. Когда заряженные частицы рождаются в ультрапериферических столкновениях протонов, можно зарегистрировать все частицы в конечном состоянии и полностью восстановить кинематику события. В результате измеряется масса родившихся частиц. Предложенный метод поиска новых заряженных частиц можно рассматривать как дополнительный к методам, основанным на измерении тормозных потерь на ионизацию или времени пролета частицы через детектор.

Интегральная светимость 150 фб^{-1} в столкновениях протонов с энергией 13 ТэВ позволяет ис-

кать заряженные частицы с массой до 190 ГэВ и временем жизни от 100 нс. К сожалению, передние детекторы экспериментов ATLAS и CMS работали не все время Run 2, поэтому доступных для анализа данных в настоящий момент меньше.

Несмотря на то, что сечение рождения новых заряженных частиц в ультрапериферических столкновениях ядер свинца на порядки больше набранной на БАК статистики, оно слишком мало, чтобы ожидать даже одно событие рождения пары частиц массой 100 ГэВ.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа поддержана грантом РФФИ 19-12-00123.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *LHCb Collab.* // Eur. Phys. J. C. 2015. V. 75. P. 595; arXiv:1506.09173
2. *CMS Collab.* // Phys. Rev. D. 2016. V. 94. P. 112004; arXiv:1609.08382
3. *ATLAS Collab.* // Phys. Rev. D. 2019. V. 99. P. 092007; arXiv:1902.01636
4. *Budnev V.M., Ginzburg I.F., Meledin G.V., Serbo V.G.* // Phys. Rep. 1975. V. 15. P. 181.
5. *Высоцкий М.И., Жемчугов Е.В.* // УФН. 2019. Т. 189. С. 975. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.07.038389>
6. *Vysotsky M.I., Zhemchugov E.V.* // Phys. Usp. 2019. V. 62. P. 910. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2018.07.038389>; arXiv:1806.07238
6. *Breit G., Wheeler J.A.* Phys. Rev. 1934. V. 46. P. 1087.
7. *Godunov S.I., Novikov V.A., Rozanov A.N., Vysotsky M.I., Zhemchugov E.V.* // J. High Energy Phys. 2020. V. 2020. No. 1. P. 143. [https://doi.org/10.1007/JHEP01\(2020\)143](https://doi.org/10.1007/JHEP01(2020)143); arXiv: 1906.08568
8. CMS Luminosity—Public Results. <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/CMSPublic/LumiPublicResults>
9. ATLAS Luminosity—Public Results. <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/AtlasPublic/LuminosityPublicResultsRun2>
10. *ATLAS Collab.* // J. High Energy Phys. 2018. V. 2018. No. 6. P. 22. [https://doi.org/10.1007/JHEP06\(2018\)022](https://doi.org/10.1007/JHEP06(2018)022); arXiv:1712.02118
11. *CMS Collab.* // J. High Energy Phys. 2018. V. 2018. No. 8. P. 16. [https://doi.org/10.1007/JHEP08\(2018\)016](https://doi.org/10.1007/JHEP08(2018)016); arXiv: 1804.07321

Long-lived Charged Particles in Ultrapерipheral Collisions at the LHC

E. V. Zhemchugov^{1, 2, *}

¹ *Alikhanov Institute for Theoretical and Experimental Physics, National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, 117218 Russia*

² *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*
*e-mail: zhemchugov@itep.ru

Received May 8, 2020; revised July 31, 2020; accepted July 31, 2020

Abstract—Production of long-lived charged particles (LLCP) with the masses of the order of 100 GeV in ultraperipheral collisions (UPC) of protons or heavy ions at the Large Hadron Collider (LHC) is considered. A new approach for the search of such particles utilizing forward detectors of the ATLAS and CMS collaborations is proposed. Achievable bounds on the masses and lifetimes of the LLCP are estimated from the currently available LHC data.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ, ПУЧКОВ ЧАСТИЦ И ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

УДК 539.126.4

ПОИСК СКАЛЯРНОГО РЕЗОНАНСА В СИСТЕМЕ $\omega\phi$ В ПИОН-ЯДЕРНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ПРИ ИМПУЛЬСЕ 29 ГэВ/с

© 2020 г. М. С. Холоденко* от группы ВЕС

*Институт физики высоких энергий Национального исследовательского центра "Курчатовский институт",
Протвино, Московская обл., 142281 Россия*

*E-mail: marina.kholodenko@ihep.ru

Поступила в редакцию 07.08.2020 г.

После доработки 11.08.2020 г.

Принята к публикации 11.08.2020 г.

Изучена реакция перезарядки $\pi^- p \rightarrow \pi\omega(783)\phi(1020)$, $\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$, $\phi \rightarrow K^+K^-$ на модернизированной установке ВЕС (У-70, Протвино) при взаимодействии пучка π -мезонов с импульсом 29 ГэВ/с с бериллиевой мишенью. Отобрано 905 событий $\omega\phi$ -системы. В распределении по инвариантной массе $\omega\phi$ -системы $M_{\omega\phi}$ наблюдается околороговый сигнал с массой $M \sim 1.9$ ГэВ/ c^2 . В результате пятичастичного парциально-волнового анализа (ПВА) обнаружено доминирование в этой области масс скалярного состояния ($J^{PC} = 0^{++}$). В предположении резонансной природы сигнала его масса и ширина определены как $M = 1814 \pm 31$ МэВ/ c^2 , $\Gamma = 182 \pm 19$ МэВ/ c^2 .

Ключевые слова: векторный мезон, эксперимент ВЕС, ИФВЭ-Протвино, фиксированная мишень, парное рождение, спектр масс: ($\phi(1020)\omega(783)$), околороговое образование: (1810), парциально-волновой анализ, масса-ширина, спин-четность, экспериментальный результат, $\phi(1020) \rightarrow K^+K^-$, $\omega(783) \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$

DOI: 10.1134/S2079562920040065

1. ВВЕДЕНИЕ

Сектор легких скалярных мезонов занимает особое место в мезонной спектроскопии. Существует неопределенность и избыточность состава одного $SU(3)$ нонета в области скалярных мезонов до 2 ГэВ: $f_0(1370)$, $f_0(1500)$, $f_0(1710)$, $f_0(1790)$, $f_0(1800)$. Возможно некоторые из этих состояний имеют отличную от $q\bar{q}$ структуру: 4-х кварковая структура, мезонная молекула и др. ([1, 2]).

Околороговый сигнал в спектре инвариантной массы $\omega\phi$ системы впервые наблюден в реакции $e^+e^- \rightarrow J/\psi \rightarrow \gamma\omega\phi$ в экспериментах BESII [3], BESIII [4], сигнал интерпретирован как скаляр $X(1800)$, но не исключен эффект взаимодействия в конечном состоянии, околороговый эффект (threshold cusp), хвост от $f_0(1710)$. В связи с этим актуально изучение данного процесса в другой реакции.

Подобный сигнал также был наблюден при взаимодействии пучка пионов с импульсами 27 и 36 ГэВ/с с бериллиевой мишенью в реакции $\pi^- p \rightarrow \phi\omega\pi$ в эксперименте ВЕС [5].

2. ЭКСПЕРИМЕНТ ВЕС

Эксперимент ВЕС расположен на ускорителе У-70 (Протвино) и работает со вторичным пучком π^- мезонов с импульсом 29 ГэВ/с. ВЕС — комбинированная установка с фиксированной мишенью для регистрации многочастичных конечных состояний заряженных частиц и фотонов, состоит из широко — апертурного магнитного спектрометра, электромагнитного калориметра, черенковских счетчиков для идентификации заряженных продуктов реакции и пучковой частицы, бериллиевой мишени толщиной 4 см ($\sim 10\%$ ядерной длины взаимодействия) и охранной системы. Проведена модернизация установки ВЕС ([6, 7]). Полный поток пучковых частиц через мишень за время используемых в анализе экспозиций составил $1.73 \cdot 10^{11}$.

3. ОТБОР СОБЫТИЙ

Рассмотрены события реакции $\pi^- p \rightarrow \omega\phi\pi$ с $\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ и $\phi \rightarrow K^+K^-$, полученные на модернизированной установке ВЕС. Отобраны события с четырьмя реконструированными заряжен-

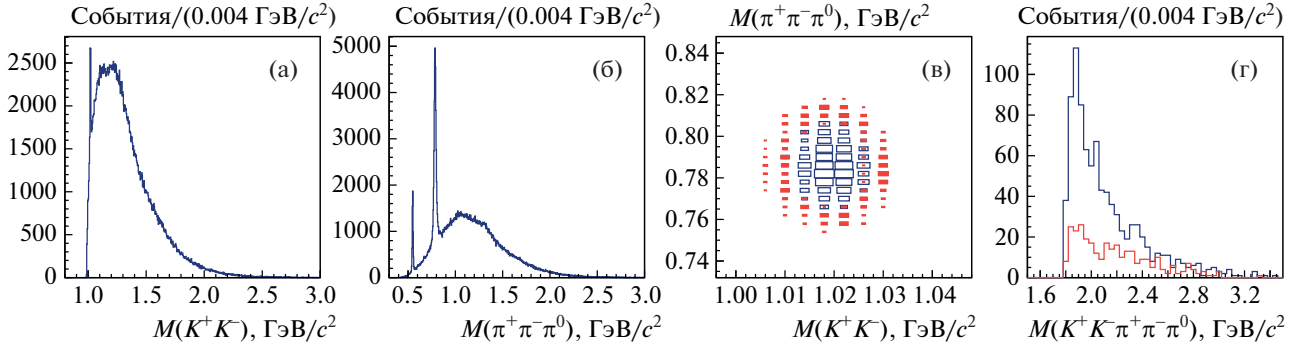


Рис. 1. Спектры инвариантных масс $M(K^+K^-)$ (а), $M(\pi^+\pi^-\pi^0)$ (б), $M(K^+K^-\pi^+\pi^-\pi^0)$ в сигнальной области (синим) (в) и вне (красным) (г).

ными треками (два положительно заряженных, два отрицательно заряженных) и двумя либо тремя γ -квантами. π^0 -мезоны зарегистрированы в $\gamma\gamma$ -мод. Для отобранных пар γ -квантов выполнен кинематический 1С фит к массе π^0 -мезона. Используя многоканальный черенковский счетчик отобранные события, содержащие $K^+K^-\pi^+\pi^-$ в конечном состоянии. Передача импульса в t -канале мала (квадрат переданного импульса $|t| < 1 \text{ ГэВ}^2/c^2$), поэтому в (квази)эксклюзивной реакции без учета частицы отдачи сумма импульсов всех частиц должна быть близка к импульсу пучка. В данном анализе наложено требование на суммарный импульс всех частиц системы $K^+K^-\pi^+\pi^-\pi^0$: $27.5 < P_{\text{tot}} < 31.0 \text{ ГэВ}/c$.

На рис. 1 представлены распределения по инвариантным массам K^+K^- (а) и $\pi^+\pi^-\pi^0$ (б), видны сигналы $\phi(1019)$ и $\omega(783)$ мезонов соответственно. Событие принимается, если массы ω , ϕ мезонов удовлетворяют эллиптическому отбору $\frac{(M_{\pi^+\pi^-\pi^0} - M_\omega)^2}{\delta_1^2} + \frac{(M_{K^+K^-} - M_\phi)^2}{\delta_2^2} < 1$, где $M_{K^+K^-}$ и $M_{\pi^+\pi^-\pi^0}$ — инвариантные массы частиц K^+K^- и $\pi^+\pi^-\pi^0$ соответственно, а $\delta_1 = 22 \text{ МэВ}/c^2$ и $\delta_2 = 8.8 \text{ МэВ}/c^2$ — выбраны в соответствии с аппаратной шириной сигналов ω и ϕ мезонов. Также для событий, удовлетворяющих всем условиям отбора, представлено распределение по массе $M(\omega\phi)$ (рис. 1г — синим), в котором наблюдается околопороговый сигнал с $M \sim 1.9 \text{ ГэВ}/c^2$.

Чтобы убедиться, что наблюдаемый околопороговый сигнал не является фоновым процессом, проведена оценка фона. Для этого отбирались события, удовлетворяющие всем критериям отбора, за исключением эллиптического обрезания на массы ω и ϕ -мезонов (выбирается область вне эл-

липса, фон от не ω , не ϕ -мезонов). Форма распределения по инвариантной массе $M(\omega\phi)$ в данной области (рис. 1г — красным) сильно отличается от сигнальной области, околопороговый сигнал не наблюдается.

Для отобранных событий с $M(\omega\phi) < 1.975 \text{ ГэВ}/c^2$ на рис. 2а показано распределение величины

$$\lambda = \frac{[p_\pi^-, p_\pi^+]}{\lambda_{\text{max}}} \quad (\text{в спиральной системе центра масс}$$

$$\omega\text{-мезона}), \quad \lambda_{\text{max}} = Q^2 \left(\frac{Q^2}{108} + \frac{m_\pi Q}{9} + \frac{m_\pi^2}{3} \right),$$

$Q = T_{\pi^+} + T_{\pi^-} + T_{\pi^0}$ (T -кинетическая энергия пионов), которое характеризует количество фоновых событий под ω -мезоном. Для сигнальных событий распределение λ характеризуется линейным ростом с пересечением 0 при $\lambda = 0$. Распределение по полярному углу каона в системе покоя ϕ -мезона (рис. 2б) соответствует ожидаемому распределению при распаде векторных мезонов. Распределение по углу θ между нормалью к распаду ω -мезона и каоном в системе покоя ϕ -мезона, представленное на рис. 2в, имеет форму $\cos^2 \theta$, что ожидается при распаде скаляра в 2 вектора с орбитальным моментом $L = 0$ (S -волна).

Проведена процедура "побинного фитирования" сигнала по переменным X : инвариантная масса системы $M(K^+K^-\pi^+\pi^-\pi^0)$, $|t|$ и P_{tot} . Построены распределения по всем переменным X , путем определения числа ω -мезонов из фита распределения по массе $M(\pi^+\pi^-\pi^0)$ для событий в полосе масс $M(K^+K^-)$ вблизи массы ϕ -мезона для каждого бина по переменной X (рис. 3а). Аналогичные распределения построены путем определения числа ϕ -мезонов. Эти два способа побинной фильтрации дают полностью совместимые результаты, что подтверждает малый уровень фона не $\omega\phi$ системы. В распределении по P_{tot} , получен-

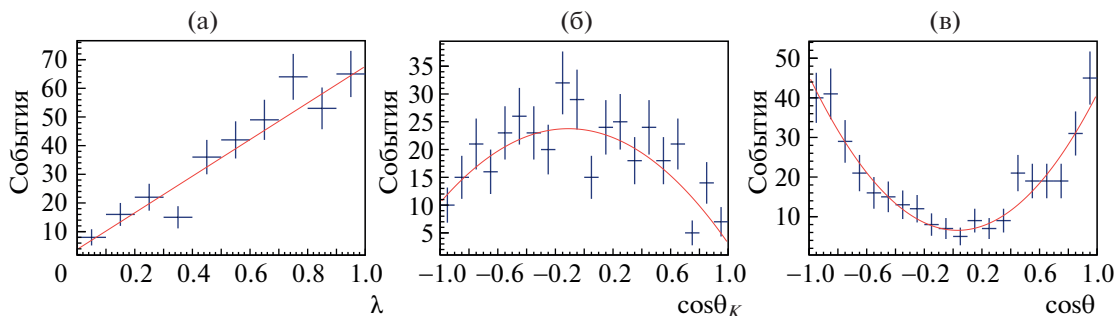


Рис. 2. Распределения для системы $\omega\phi$: (а) по нормированной длине нормали к плоскости распада ω λ ; (б) по полярному углу K^+ в системе покоя ϕ ; (в) по углу между нормалью к плоскости распада ω и каоном в системе покоя ϕ . Сплошными красными линиями показаны фиты распределений.

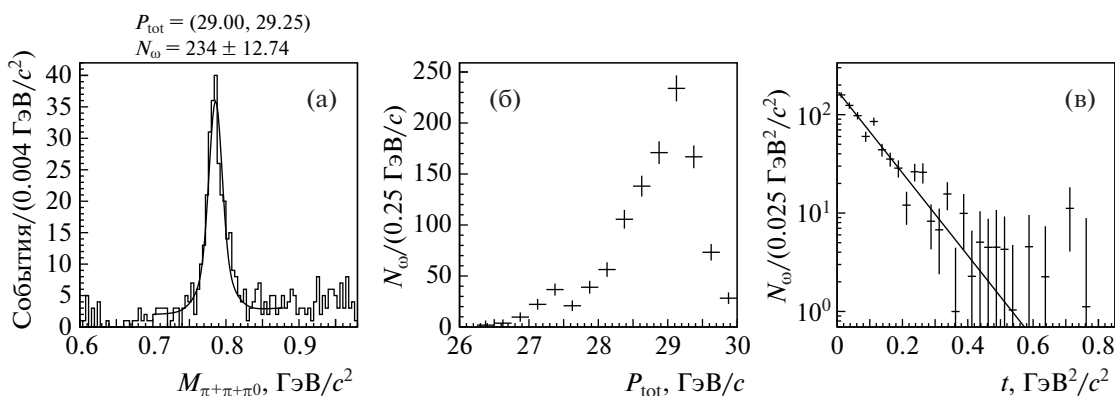


Рис. 3. (а) Фит сигнала ω -мезона для одного бина по переменной P_{tot} ; распределения по P_{tot} (б) и $|t|$ (в), полученные в результате побинной фильтрации.

ному побинной фильтрацией (рис. 3б), наблюдается пик, соответствующий эксклюзивному выделению изучаемой системы. Неэксклюзивный фон, проявляющийся как подложка слева от пика, составляет около 10%. Полученное распределение по $|t|$ (рис. 3в) имеет экспоненциальный вид с наклоном $-9.6 \pm 0.5 \text{ ГэВ}^{-2}/c^2$, характерным для пионного обмена.

4. ПАРЦИАЛЬНО-ВОЛНОВОЙ АНАЛИЗ

Пятичастичный ПВА системы $\omega\phi$ выполнен в диапазоне масс (1.78–3.4) $\text{ГэВ}/c^2$ с бином по массе 60 $\text{МэВ}/c^2$ в едином диапазоне по $|t|$ (0–1) $\text{ГэВ}^2/c^2$. Амплитуды построены методом нерелятивистского формализма тензоров Земаха [8]. Параметрами фита является блочно-диагональная по натуральности обмена (reflectivity — симметрия относительно плоскости рождения) матрица плотности состояний. Используется расширенный метод максимального правдоподобия для нахождения пара-

метров с учетом аксептанса установки. Амплитуды включают спектральные линии ω, ϕ -мезонов, которые определены как функции Гаусса с дисперсией, определяемой разрешением установки и превышающей собственные ширины мезонов. ПВА выполнен со следующим набором волн с квантовыми числами $J^{PC} M^\eta$, где J^{PC} — спин и P — четность, C — четность, M^η — проекционное число M и натуральность η .

- FLAT — псевдоволна с равномерным распределением по фазовому объему 5-ти частичной системы для эффективного учета фона и несовершенства модели;

- $J^{PC} M^\eta = 0^{++} 0^-, 2^{++} 0^-, 0^{-+} 0^+$.

Результаты ПВА с учетом аксептанса установки, составившего в области масс изучаемой системы около 8%, представлены на рис. 4. Интенсивности волн, полученные в результате двух анализов на установке ВЕС, полностью совместимы, доминирует волна $J^{PC} = 0^{++}$. Данные по инте-

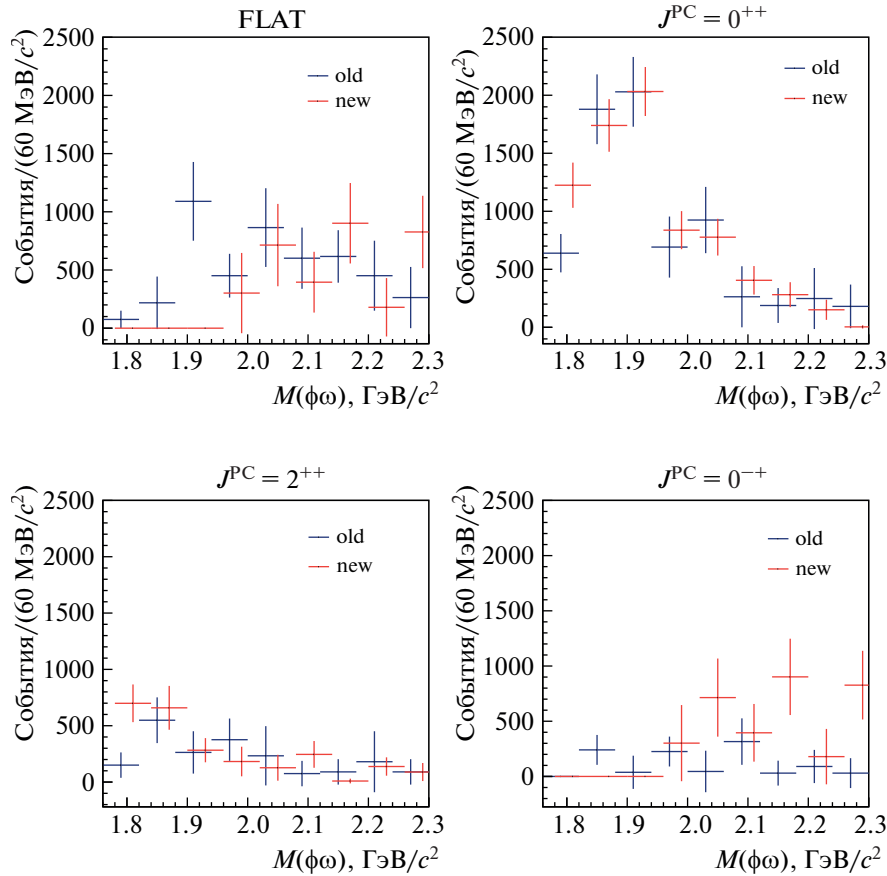


Рис. 4. Интенсивности волн $\phi\omega$ системы: красным — данные модернизированной установки ВЕС, синим — данные установки ВЕС до модернизации.

гравитационному потоку пучковых частиц через мишень для предыдущего анализа данных отсутствуют, грубая оценка составляет $4 \cdot 10^{11}$.

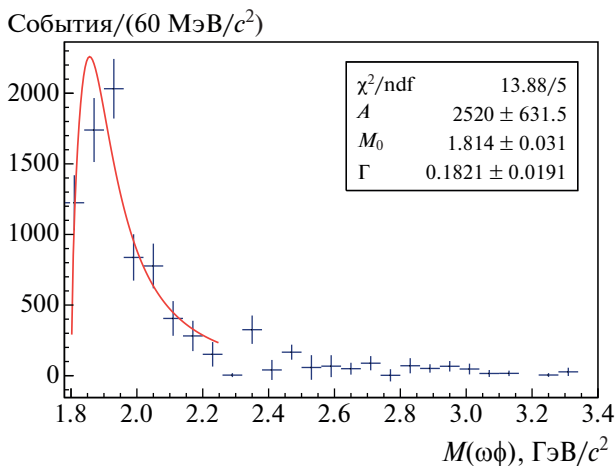


Рис. 5. Фит волны 0^{++} функцией $f(M)$ (1).

В предположении резонансной природы наблюдаемого образования определена его масса и ширина: $M = 1814 \pm 31$ МэВ/ c^2 , $\Gamma = 182 \pm 19$ МэВ/ c^2 . Фит выполнен следующей функцией (рис. 5):

$$f(M) = \begin{cases} 0, & M < (M_\omega + M_\phi) \\ PhS(M) \cdot A \cdot BW(M), & M > (M_\omega + M_\phi) \end{cases}, \quad (1)$$

где $BW(M) = \frac{1}{(M^2 - M_0^2)^2 + M_0^2 \Gamma^2}$ — функция Брейта–Вигнера; $PhS(M) = |p_\omega|/M$ — функция двухчастичного фазового пространства.

Полученные параметры сигнала коррелируют. При фиксации параметров M_0 , Γ получаем $A = 2520 \pm 160$, что соответствует числу событий в пике $N = 7230 \pm 459$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На данных модернизированной установки ВЕС отобраны события реакции $\pi^- p \rightarrow \phi\pi$. В спектре масс $M(\phi\omega)$ наблюдается пороговая осо-

бенность, в которой доминирует состояние $J^{PC} = 0^{++}$. Спектр масс $M(\omega\phi)$ и результаты ПВА совместимы с полученными в более раннем анализе на установке ВЕС. В предположении резонансной природы сигнала $f_0(1800)$ его масса и ширина определены как $M = 1814 \pm 31$ МэВ/ c^2 , $\Gamma = 182 \pm 19$ МэВ/ c^2 . Близость сигнала к порогу искажает брейт-вигнеровскую форму. Кроме того, возможны другие механизмы образования околопорогового пика, например от подпорогового резонанса $f_0(1710)$ [9]. Возможно одна из этих причин объясняет сравнительно плохую подгонку сигнала ($\chi^2/\text{ndf} \sim 3$).

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-02-00246 А.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *van Beveren E., Rijken T.A., Metzger K., Dullemond C., Rupp G., Ribeiro J.E.* // Z. Phys. 1986. V. 30. P. 615; arXiv:0710.4067 [hep-ph].
2. *Pelaez J.R.* // Mod. Phys. Lett. A. 2004. V. 19. P. 2879; arXiv:hep-ph/0411107.
3. *Ablikim M. et al.* (BES Collab.) // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. P. 162002; arXiv:hep-ex/0602031.
4. *Ablikim M. et al.* (BESIII Collab.) // Phys. Rev. D. 2013. V. 87. P. 032008; arXiv:1211.5668 [hep-ex].
5. *Nikolaenko V. et al.* // Int. J. Mod. Phys. A. 2009. V. 24. P. 295.
6. *Dorofeev V.A. et al.* // Instrum. Exp. Tech. 2016. V. 59. P. 658.
7. *Ivashin A., Matveev V., Khokhlov Yu.* IHEP Preprint 2010-10. 2010. Protvino: IHEP.
8. *Zemach Ch.* // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. B97.
9. *Martinez Torres A., Khemchandani K., Navarra F., Nielsen M., Oset E.* // Phys. Lett. B. 2013. V. 719, P. 388; [arXiv:1210.6392 [hep-ph]].

Search for a Scalar Resonance in the $\omega\phi$ System in the Collision of a 29 GeV/c Pion Beam with a Nuclear Target

M. S. Kholodenko* (on behalf of the VES Collaboration)

Institute for High Energy Physics, National Research Center Kurchatov Institute, Protvino, Moscow region, 142281 Russia

**e-mail: marina.kholodenko@ihep.ru*

Received August 7, 2020; revised August 11, 2020; accepted August 11, 2020

Abstract—The charge-exchange reaction $\pi^- p \rightarrow n\omega(783)\phi(1020)$, $\omega \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$, $\phi \rightarrow K^+K^-$ is studied on the upgraded VES facility (U-70, Protvino). There are 905 events of $\omega\phi$ -system selected. The signal near threshold ($M \sim 1.9$ GeV/ c^2) is observed in $\omega\phi$ invariant mass. The five-particles partial wave analyses shows that $J^{PC} = 0^{++}$ state dominates. Under the assumption of the resonant nature of the signal, its mass and width are obtained: $M = 1814 \pm 31$ MeV/ c^2 and $\Gamma = 182 \pm 31$ MeV/ c^2 .

Keywords: vector meson, VES Experiment, IHEP-Protvino, fixed-target, pair production, mass spectrum: ($\Phi(1020)$ $\omega(783)$), mass enhancement: (1810), partial wave analysis, mass: width, spin: parity, experimental results, $\Phi(1020) \rightarrow K^+ K^-$, $\omega(783) \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0$

УДК 538.9

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

© 2020 г. М. В. Лукомская^а, *, О. В. Павловский^а, **^а Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, ул. Ленинские горы, 1-3, Москва, 119991 Россия

*E-mail: mv.lukomskaya@physics.msu.ru

**E-mail: ovp@goa.bog.msu.ru

Поступила в редакцию 08.05.2020 г.

После доработки 04.08.2020 г.

Принята к публикации 04.08.2020 г.

В настоящее время физика графена направлена на то, чтобы найти способ управления запрещенной зоной графена — это необходимо для применения графена в нанoeлектронике. Целью данной работы является исследование систем, нарушающих инверсионную симметрию гексагональной решетки. В работе получены электронные свойства графеновых нанолент типа кресло и зигзаг и показана зависимость электронных свойств от краевых эффектов.

Ключевые слова: графен, графеновые наноленты, дефект

DOI: 10.1134/S2079562920040120

1. ВВЕДЕНИЕ

Графен — двумерный материал, экспериментально был получен в 2004 г. А.К. Геймом, К.С. Новоселовым и др. [1]. Привлекательной особенностью графена является наличие безмассовых носителей заряда. Данное свойство делает графен очень перспективным материалом в области нанотехнологий. Существование таких носителей обусловлено симметрией кристаллической решетки, которая и ведет к отсутствию запрещенной зоны в зонной структуре. В случае нарушения подрешеточной симметрии спектр графена изменяется и возникает запрещенная зона.

Понимание механизмов влияния дефектов в графене на его энергетический спектр, а именно обретение способности управления энергетической щелью — это актуальная проблема современной физики графена, решение которой является необходимым шагом для будущего развития электроники. Существуют разные способы нарушения симметрии например нарушение за счет использования различных подложек таких, как h-BN [2] или за счет нарушения симметрии кристаллической решетки графена.

В данной работе изучено нарушение инверсионной симметрии, которое возможно, как в направлении оси x , так и в направлении оси y . Гексагональная решетка может быть разрезана тремя способами — это границы типа: кресло, зигзаг и смешанные границы [3–5]. Используя приближение сильносвязанных электронов мы получили зонную структуру графеновых нанолент с границами типа кресло и зигзаг (рис. 1), а так же по-

казали, что энергетический спектр меняется в зависимости от типа границы.

2. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

2.1. Элементарная ячейка

Ширина наноленты N определяется количеством димерных линий для нанорибона типа кресло и количеством зигзагообразных цепей для нанорибона типа зигзаг. Наименьшая ширина для нанорибонов типа кресло равна $N = 3$, такая элементарная ячейка содержит $n = 6$ атомов (рис. 2),

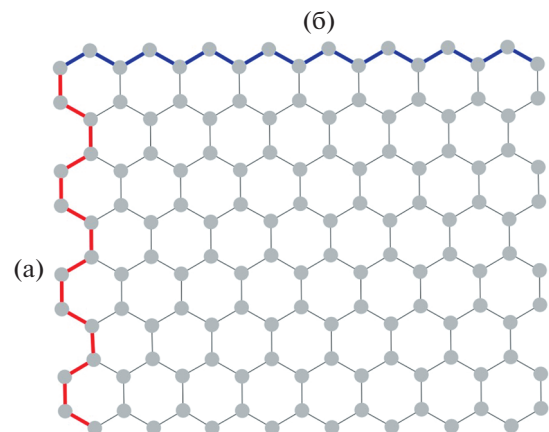


Рис. 1. Типы границ, которыми можно разрезать гексагональную решетку: (а) тип границы кресло, (б) тип границы зигзаг.

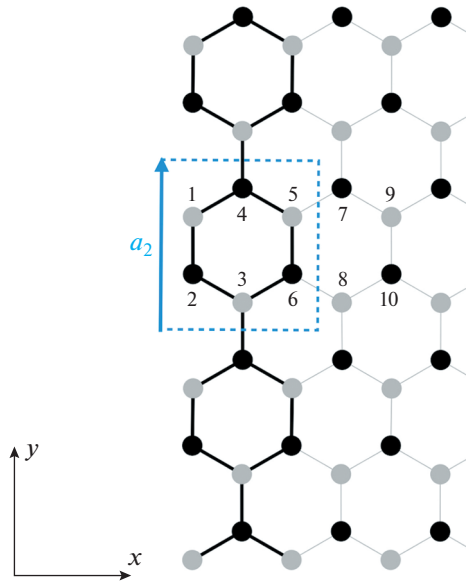


Рис. 2. Элементарная ячейка графеновой наноленты типа кресло. Номером обозначено положение атома в элементарной ячейке. Подрешетки А и В выделены разными цветами. Вектор a_1 – основной вектор решетки.

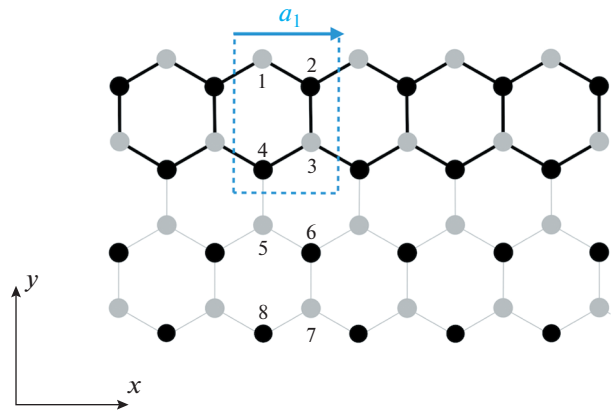


Рис. 3. Элементарная ячейка графеновой наноленты типа зигзаг. Номером обозначено положение атома в элементарной ячейке. Подрешетки А и В выделены разными цветами. Вектор a_1 – основной вектор решетки.

для нанорибонов типа зигзаг $N = 2$ (рис. 3), а в элементарной ячейке содержится $n = 4$ атома. Основные векторы элементарных ячеек нанорибонов типа зигзаг и типа кресло $a_1 = ax$ и $a_2 = a\sqrt{3}y$ соответственно. Тогда основные векторы обратной решетки будут иметь вид $b_1 = \frac{2\pi}{a}x$ и $b_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}y$.

2.2. Зонная структура

Зонная структура графеновых нанолент может быть рассчитана из Гамильтоновой матрицы. Количество зон соответствует количеству состояний включенных в модель. Так как мы рассматриваем только π -орбиталь каждого атома, число зон будет эквивалентно количеству атомов n , что есть также размерность Гамильтоновой матрицы

$$H(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} \end{bmatrix} \quad (1)$$

расписывая H_{ij}

$$\psi_i H \psi_j = t_1 \left(e^{\frac{i a_x k_x}{\sqrt{3}}} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(-k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(-k_x - \sqrt{3}k_y)} \right), \quad (2)$$

$$\psi_j H \psi_i = t_1 \left(e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(k_x - \sqrt{3}k_y)} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{-\frac{i a_x k_x}{\sqrt{3}}} \right). \quad (3)$$

Матричные элементы H_{ij} Гамильтоновой матрицы получаются путем учета взаимодействия каждого атома с его соседями, находящимися в той же элементарной ячейке и/или в соседних ячейках. Если i -й атом взаимодействует с j -м атомом, находящимся в той же элементарной ячейке, то $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ или элемент H_{ij} будет равен t_{ij} . Если же i -й атом взаимодействует с j -м атомом, находящимся в другой элементарной ячейке, то $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ или элемент H_{ij} будет равен $t_{ij} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$, где $\mathbf{R}$ – вектор трансляции.

В данной работе учитываются хоппинги только между ближайшими соседями. Накладываем периодические граничные условия по оси y для нанолент типа кресло и по оси x для нанолент типа зигзаг. Выпишем исходя из (рис. 2) необходимые $\mathbf{k}$ и $\mathbf{R}$ для получения матричных элементов Гамильтоновой матрицы

$$\mathbf{R} = a(\pm 1, R_y), \quad \mathbf{R} = a\left(\pm \frac{1}{2}, R_y\right), \quad \mathbf{k} = (0, k_y); \quad (4)$$

тогда матрица для нанолент типа кресло с $N = 3$ ($n = 6$), будет иметь вид

$$H(k_y) = \begin{bmatrix} \mathcal{E} & t & 0 & t & 0 & 0 \\ t & \mathcal{E} & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & \mathcal{E} & t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} & 0 & t \\ t & 0 & t_{ij} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} & \mathcal{E} & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & \mathcal{E} & t \\ 0 & 0 & t & 0 & t & \mathcal{E} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Из положения атомов нанорибона типа зигзаг (рис. 3) получим $\mathbf{k}$ и $\mathbf{R}$

$$\mathbf{R} = a \left(R_x, \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{k} = (k_x, 0); \quad (6)$$

тогда Гамильтонова матрица для наноленты типа зигзаг с $N = 2$ ($n = 4$) примет следующий вид

$$H(k_x) = \begin{bmatrix} \mathcal{E} & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & 0 & 0 \\ t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & \mathcal{E} & t & 0 \\ 0 & t & \mathcal{E} & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x \\ 0 & 0 & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & \mathcal{E} \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Здесь мы используем типичные параметры сильной связи для графена $\mathcal{E} = 0$ эВ и $t = -2.74$ эВ [6], несмотря на это матрицы остаются довольно сложными для аналитического решения, при этом рассмотренные выше системы имеют минимально возможные элементарные ячейки. Для решения таких систем и более сложных необходимо применять численные методы. В настоящей работе для исследования описанных выше систем, а так же и для более сложных, была написана про-

грамма на языке программирования C с использованием LAPACK.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В результате численного решения задачи были получены графики зонной структуры для графеновых нанолент с краями типа кресло и зигзаг, имеющих разную ширину N и соответственно разное количество атомов в элементарной ячейке.

На рис. 4 построены графики графеновых нанолент типа кресло с числом димерных линий

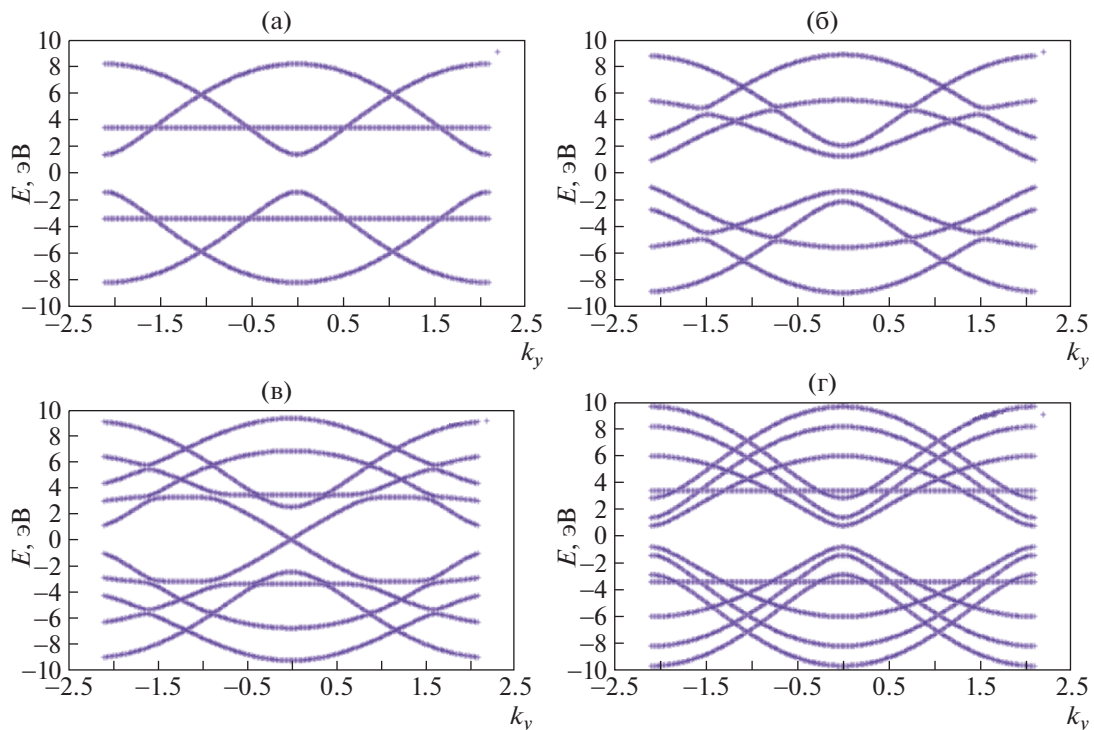


Рис. 4. Зонная структура графеновых нанолент типа кресло. Они будут либо полупроводниками при $N = 3p + 2$ (такому состоянию соответствуют графики: (а) $N = 3$, (б) $N = 4$, (г)), $N = 7$ либо полуметаллами при $N = 3p$ или $N = 3p + 1$ – график (в) $N = 5$. Здесь N – длина наноленты.

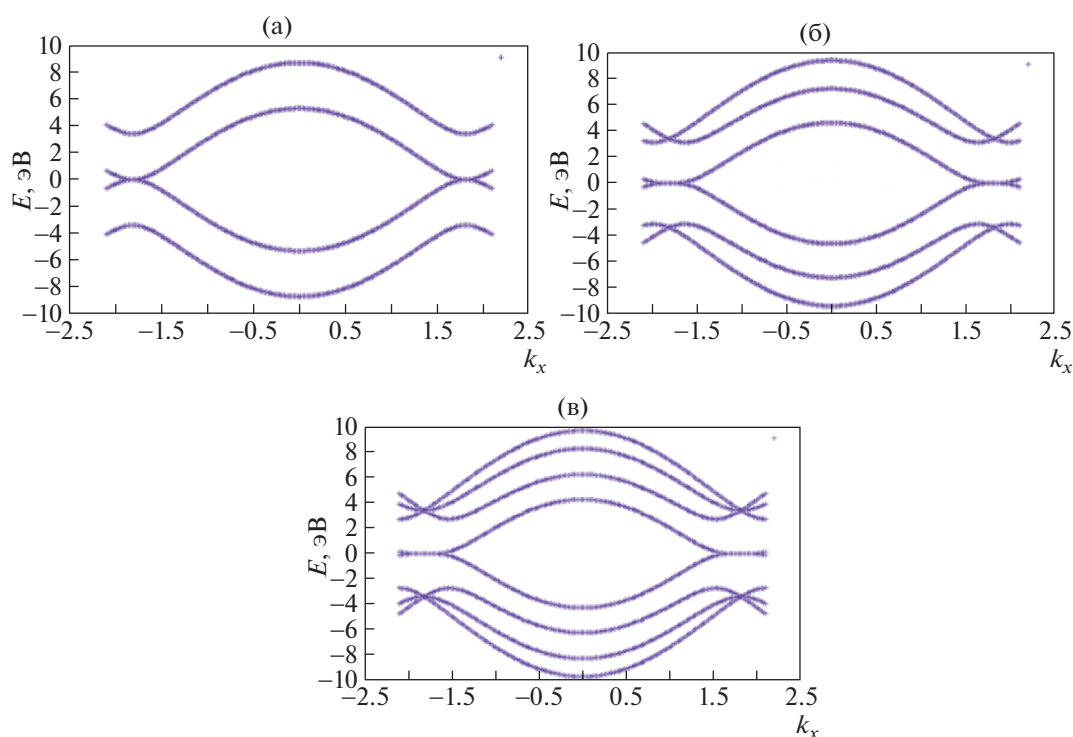


Рис. 5 Зонная структура графеновых нанолент типа зигзаг. Наноленты этого типа всегда являются металлическими: (а) $N = 2$, (б) $N = 3$, (в) $N = 4$, где N — длина наноленты.

$N = 3, 4, 5, 7$ и количеством атомов в элементарных ячейках $n = 6, 8, 10, 14$ соответственно. В этих моделях наноленты типа кресло являются либо полуметаллами, либо полупроводниками в зависимости от ширины ленты. Рассмотрим подробнее каждый случай. На графиках (а) $N = 3$, (б) $N = 4$, (г) $N = 7$ (рис. 4) присутствует запрещенная зона, наноленты в этом случае являются полупроводниками. Видно, что ширина запрещенной зоны нанолент типа кресло уменьшается по мере увеличения ширины ленты. Заметим, что наноленты типа кресло могут быть полупроводниками при следующем условии $N = 3p + 2$ (где p — положительное целое число). Теперь остановимся на графике рис. 4в, здесь зона проводимости и валентная зона соприкасаются в одной точке, таким образом наноленты типа кресло являются полуметаллами при $N = 3p$ или $N = 3p + 1$.

На рис. 5 представлены графики для графеновых нанолент типа зигзаг с числом зигзагообразных линий $N = 2, 3, 4$ и соответственно количеством атомов в элементарных ячейках $n = 4, 6, 8$. Как видно из спектра (рис. 5: (а) $N = 2$, (б) $N = 3$, (в) $N = 4$, наноленты типа зигзаг всегда металлические, так как при любой длине наноленты происходит перекрытие зон.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Расчеты показывают, что наноленты с границей типа зигзаг не обладают энергетической щелью и являются проводящими. Более сложная картина наблюдается в случае нанолент с краем типа кресло. Для таких нанолент практически любой ширины мы наблюдаем запрещенную зону, кроме некоторых случаев. Эти случаи интересны тем, что в нанолентах шириной 10, 16 и т.д. генерируется только одна точка Ферми, а не две, как в случае свободного графена. Это указывает на исключительный характер такой конфигурации, что интересно как с физической точки зрения, так и с точки зрения технологических приложений.

В данной работе мы рассмотрели модель, в которой учитывается хоппинг только между ближайшими соседями. Стоит отметить, что учет дальних хоппингов также возможен, анализ такой системы будет проведен в будущей работе. Что касается графена, то опыт его исследования говорит, что качественно картина не поменяется, учет дальних хоппингов дает небольшое уточнение.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа О.В.П. поддержана грантом Рос-сийского научного фонда (проект № 16-12-10059).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Dubonos S.V., Zhang Y., Jiang D.* // arXiv: cond-mat/0410631. 2004.
2. *Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 17954.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>
3. *Aliofkhazraei M., Ali N., Milne W.I. et al.* Graphene Science Handbook. Nanostructure and Atomic Arrangement. 2016. Boca Raton, FL, USA: CRC.
4. *Wakabayashi K., Fujita M., Ajiki H., Sigrist M.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 8271.
5. *Son Y.-W., Cohen M.L., Louie S.G.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 97. P. 216803.
6. *Kundu R.* // arXiv:0907.4264 [cond-mat.mtrl-sci]. 2009.

Electronic Properties of Graphene Nanoribbons

M. V. Lukomskaya^{1, *} and O. V. Pavlovsky^{1, **}¹ Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*e-mail: mv.lukomskaya@physics.msu.ru**e-mail: ovp@goa.bog.msu.ru

Received May 8, 2020; revised August 4, 2020; accepted August 4, 2020

Abstract—Nowadays, graphene physics is aimed at finding a way to control the band gap of graphene, which is necessary for application of graphene in nanoelectronics. The purpose of this work is to investigate the systems that break an inversion symmetry of a hexagonal lattice. The electronic properties of armchair and zigzag graphene nanoribbons are obtained and the dependence of the electronic properties on the edge effects is shown.

Keywords: graphene, graphene nanoribbons, defect