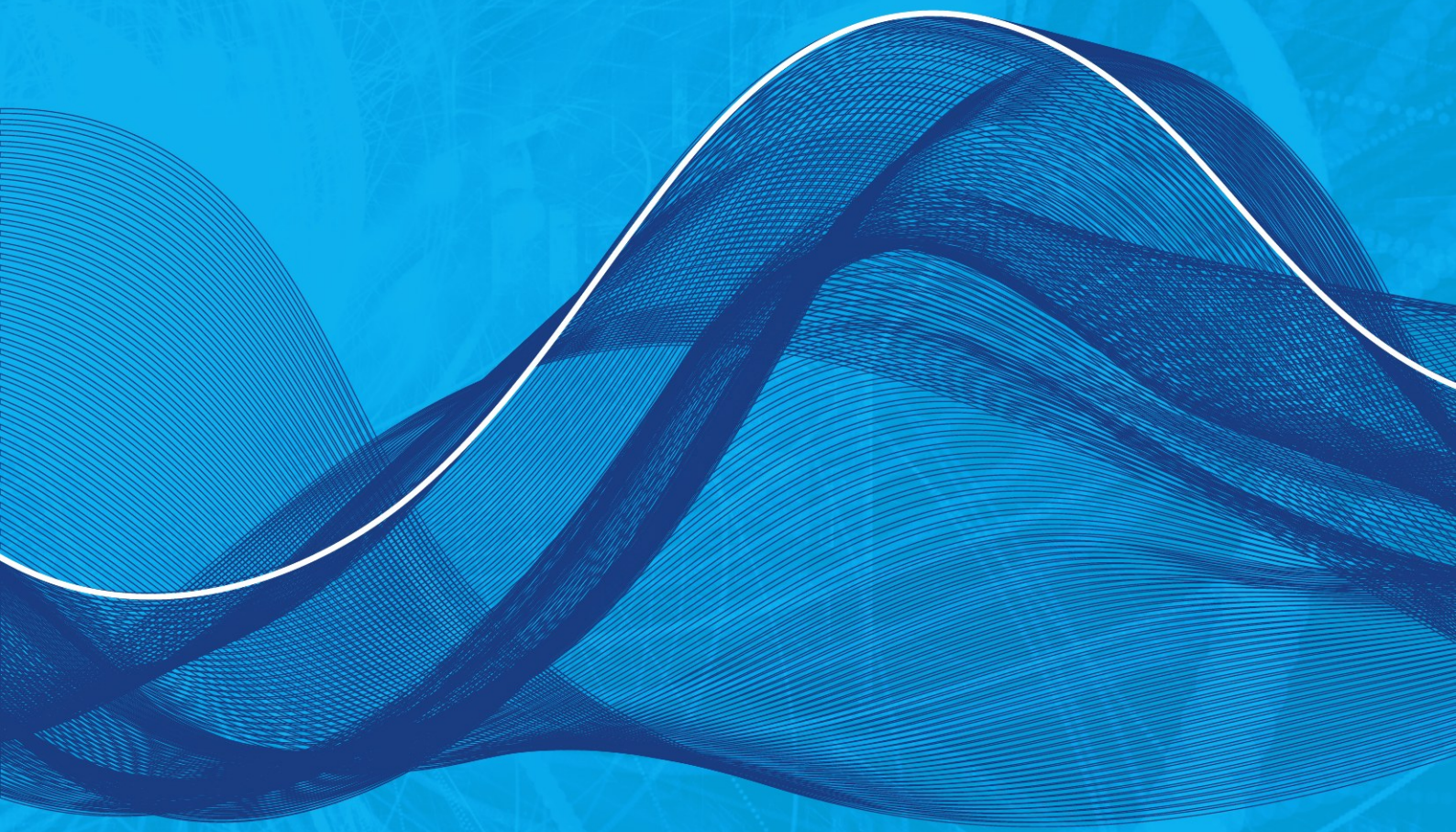
Международный Симпозиум

ОТ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ К МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

Приуроченный к 90-летию академика РАН
Кева Минуллиновича Салихова



Пять дней, чтобы вместе докопаться до сути

ПРОГРАММА

30 октября – 3 ноября 2026 г. – Казань

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Российская Академия Наук

Правительство
Республики Татарстан

Министерство образования и науки
Республики Татарстан

Академия наук
Республики Татарстан

Казанский научный центр Российской академии наук
1945

Казанский физико-технический институт
имени Е. К. Завойского

© ИП АКСЁНОВ И.А. * ДИЗАЙН И МАКЕТ * 2026

Пятница, 30 октября — Открытие | Постановка задач для мастерских

ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

09:00 – 10:00 **Регистрация**

Председатель секции: С.М. Хантимеров

(руководитель КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

10:00 – 10:10 Торжественное открытие симпозиума. Руководитель ФИЦ КазНЦ РАН, член-корреспондент РАН **Алексей Алексеевич Калачев**
10:10 – 10:20 Открытие рабочей сессии симпозиума. Руководитель КФТИ им. Е. К. Завойского **Сергей Мансурович Хантимеров**
10:20 – 11:10 Кинетические уравнения в теории движения открытых систем. Вступительный доклад, академик РАН **К. М. Салихов,** научный руководитель КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань

11:10 – 11:30 **Перерыв,** кофе

Председатель секции: С. В. Демишев

(ИФВД им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва)

11:30 – 12:30 ***Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы***

11:30 **Н. Н. Лукзен** (Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск) — Кинетические уравнения релаксации долгоживущих ядерных спиновых состояний при обратимом связывании лиганда с белком.
11:50 **А. И. Иванов** (Волгоградский государственный университет, Волгоград) — Кинетика возбуждённых октупольных молекул в электромагнитном поле: от вибронной когерентности до «противовращения» гармоник.
12:10 **П. А. Французов** (ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск) — Загадка мерцания нанокристаллов: от загадочного явления до кинетических уравнений.

12:30 – 13:30 **Обеденный перерыв**

Председатель секции: А. И. Иванов

(Волгоградский государственный университет, Волгоград)

13:30 – 15:00 ***Постановка задач для мастерских, 20 мин. доклад + 10 мин. вопросы***
Какая величина измеряется, что известно о временных масштабах, что не сходится.

13:30 **Н. Л. Асфандиаров** (ИФМК УФИЦ РАН, Уфа) — Существует ли интерференция каналов выброса электронов из анионов в газовой фазе?
14:00 **В. В. Алексеенко** (ИРНИТУ, Иркутск) — Микроскопический механизм перемещения атомов сверхтекучей фазы.
14:30 **В. Ф. Лебедев** (ГУАП, Санкт-Петербург) — Формулировка и решение системы скоростных уравнений в системе NV^-, С-центров в HPHT-алмазе с целью описания процессов создания инверсии населённостей и лазерной генерации.

15:00–15:30 **Перерыв,** кофе

Председатель секции: П. А. Французов

(ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск)

15:30 – 17:30 ***Постановка задач для мастерских, 20 мин. доклад + 10 мин. вопросы***

15:30 **Е. Р. Кочаровская, В. В. Кочаровский** (ИПФ РАН, Нижний Новгород) — Коллективные моды в модели трёх связанных ансамблей активных центров (спиновых или атомных) в низкодобротном резонаторе.
16:00 **Р. В. Ли** (ИХКГ СО РАН, Новосибирск) — Квантовое измерение как немарковский процесс: поиск кинетического уравнения с памятью об истории коллапсов.

16:30 Н. Г. Маликов (ГК ИНТЕХ, Москва) — Детальные кинетические уравнения для акустического катализа как процесса с макрозапутанными фонон-электронными состояниями: обоснование гигантского резонансного усиления скорости реакции (до 2000×).
17:00 Р. А. Подаров (МТЦ СО РАН, Новосибирск) — Кинетика спиновой поляризации триплетов Zn-порфиринов замедляется на порядок при почти неизменных параметрах расщепления в нулевом поле.

17:30 – 18:00 Перерыв

18:00 – 19:30 Фуршет

19:00 – 21:00 *Вечерний дискуссионный клубдля участников*

◆ **Суббота, 31 октября — Мастерские | Устные доклады | Постерная сессия (10:00-17:00)**
КНИТУ-КАИ, улица Четаева, д.18А
Автобусы для участников – в 8:30 от ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

09:30 – 11:00 *Мастерские. Механизм, модель, оценки характерных времён*

◆ **Мастерская № 1 — задача Н. Л. Асфандиарова** (ИФМК УФИЦ РАН, Уфа)
Руководитель: А. И. Иванов (Волгоградский государственный университет, Волгоград)

◆ **Мастерская № 2 — задача Е. Р. Кочаровской, В. В. Кочаровского** (ИПФ РАН, Нижний Новгород) Руководитель: К. Б. Циберкин (ПГНИУ, Пермь)

◆ **Мастерская № 3 — задача В. Ф. Лебедева** (ГУАП, Санкт-Петербург)
Руководитель: П. А. Французов (ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск)

◆ **Мастерская № 4 — задача В. В. Алексеенко** (ИРНИТУ, Иркутск)
Руководитель: П. А. Пуртов (ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск)

11:00 – 11:15 Перерыв, кофе

11:15 – 12:30 *Мастерские: продолжение*

12:30 – 13:30 Обеденный перерыв

◆ **Председатель секции: Л. Р. Тагиров**
(КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

13:30 – 15:00 *Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы*

13:30 С. В. Демишев (ИФВД им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва) — Что мы знаем и чего мы не знаем об уравнении Ландау–Лифшица?
13:50 М. Г. Васин (ВНИИА им. Н. Л. Духова, Москва) — Вывод уравнений Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта в представлении спинов майорановскими спинорами.
14:10 Е. Р. Кочаровская (ИПФ РАН, Нижний Новгород) — Влияние неоднородного уширения на режимы генерации.
14:30 Е. В. Радионычев (ИПФ РАН, Нижний Новгород) — Применение квантовых кинетических уравнений для описания эффектов резонансного мёссбауэровского взаимодействия фотонов с энергией 14,4 кэВ с ядрами Fe-57.

15:00 – 15:30 Перерыв, кофе

◆ **Председатель секции: С. А. Моисеев**
(КНИТУ-КАИ им. А. Н. Туполева, Казань)

15:30 – 16:30 *Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы*

15:30 К.Б. Циберкин (ПГНИУ, Пермь) — Проявления хаотизации и термализации спиновых структур конечной размерности.
15:50 Л. Р. Тагиров (КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань) — Обменное сужение линий ЭПР в сверхпроводниках: роль пространственных масштабов.
16:10 Д. С. Рыбин (ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск) — Кинетика деформационно-индуцированных реакций: от дискретного анализа к мониторингу в реальном времени.

16:30 – 16:50 Перерыв

- **Председатель секции: Р. Б. Зарипов**
(КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

16:50 – 17:30 ***Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы***

16:50 К. И. Герасимов (Казанский квантовый центр КНИТУ-КАИ, Казань) — Суперфлуоресценция и сверхизлучательная лазерная генерация в монокристалле $YPO_4:Er^{3+}$ на длине волны телекоммуникационного диапазона.
17:10 Р. В. Ли (ИХКГ СО РАН, Новосибирск) — Уравнения полностью модифицированной теории встреч (СМЕТ) как результат анализа микроскопической кинетики многостадийных реакций.

Автобусы для участников – в 17:45 от КНИТУ-КАИ до ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

18:30 – 20:30 ***Вечерний дискуссионный клуб: обсуждение задачи Р. В. Ли «Квантовое измерение как немарковский процесс: поиск кинетического уравнения с памятью об истории коллапсов».***

- **Воскресенье, 1 ноября — Мастерские | Устные доклады | Постерная сессия (10:00-17:00)**
КНИТУ-КАИ, улица Четаева, д 18А
Автобусы для участников – в 8:30 от ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

09:30 – 11:00 ***Мастерские: проверка полученных результатов***

- **Мастерская № 1 — задача Н. Л. Асфандиарова** (ИФМК УФИЦ РАН, Уфа)
Руководитель: А. И. Иванов (Волгоградский государственный университет, Волгоград)
- **Мастерская № 2 — задача Е. Р. Кочаровской, В. В. Кочаровского** (ИПФ РАН, Нижний Новгород) Руководитель: К. Б. Циберкин (ПГНИУ, Пермь)
- **Мастерская № 3 — задача В. Ф. Лебедева** (ГУАП, Санкт-Петербург)
Руководитель: П. А. Французов (ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск)
- **Мастерская № 4 — задача Р. А. Подарова** (МТЦ СО РАН, Новосибирск)
Руководитель: Н. Н. Лукзен (Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск)

11:00 – 11:15 Перерыв, кофе

11:15–12:30 ***Мастерские: продолжение. Подготовка к круглым столам. Формулировка экспериментов, следующих из полученных уравнений.***

12:30 – 13:30 Обеденный перерыв

- **Председатель секции: А. А. Суханов**
(КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

13:30 – 14:50 ***Онлайн-сессия: устные доклады участников, выступающих дистанционно. 15 минут доклад + 5 минут вопросы***

13:30 К. Ш. Муртазаев (Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала) — Исследование критических свойств антиферромагнитных систем методом Монте-Карло и машинным обучением.
13:50 Н. М. Созонова (УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск) — Моделирование ионного облучения структуры углерод–железо.
14:10 К. П. Сидоров (ТПУ, Томск) — Разделение временных масштабов в модели теплообменника для диагностики загрязнения поверхности теплообмена.
14:30 А. М.-З. Агаларов (Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала) — Коллективное явление и искусственный интеллект в рое роботов.

14:50 – 15:20 Перерыв, кофе

◆ **Председатель секции: Ю. И. Таланов**
(КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

15:20 – 16:40 ***Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы***

15:20 **В.В. Алексеенко** (ИРНИТУ, Иркутск) — О природе сверхтекучей фазы в жидком He^4.
15:40 **Ж. Х. Пулотов** (КФУ, Казань) — Влияние композиционных трансформаций на магниторезонансные свойства гетероструктур $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$.
16:00 **М. П. Желифонов** (Казанский государственный энергетический университет, Казань) — Коллективные моды человеческих сообществ.
16:20 **Н. Х. Усеинов** (КФУ, Казань) — От спиновой динамики электронов в магнитном туннельном контакте до спин-поляризованного тока.

Автобусы для участников – в 17:45 от КНИТУ-КАИ до ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

18:30 – 20:30 ***Вечерний дискуссионный клуб: обсуждение задачи Н.Г. Маликова «Детальные кинетические уравнения для акустического катализа как процесса с макрозапутанными фонон-электронными состояниями: обоснование гигантского резонансного усиления скорости реакции (до 2000×)».***

◆ **Понедельник, 2 ноября — Результаты работы мастерских.**
ФИЦ КазНЦ РАН, ул. Лобачевского, д. 2/31

◆ **Председатель секции: академик РАН В. В. Кочаровский**
(ИПФ РАН, Нижний Новгород)

09:30 – 11:00 ***Круглые столы: результаты мастерских. 45 минут на задачу: доклад и обсуждение.***

09:30 **Н. Л. Асфандиаров** (ИФМК УФИЦ РАН, Уфа) — Существует ли интерференция каналов выброса электронов из анионов в газовой фазе?
10:15 **В. Ф. Лебедев** (ГУАП, Санкт-Петербург) — Формулировка и решение системы скоростных уравнений в системе NV^-, С-центров в HPHT-алмазе с целью описания процессов создания инверсии населённостей и лазерной генерации.

11:00 – 11:30 **Перерыв,** кофе

◆ **Председатель секции: академик РАН В. В. Кочаровский**
(ИПФ РАН, Нижний Новгород)

11:30 – 13:00 ***Круглые столы: результаты мастерских. 45 минут на задачу: доклад и обсуждение.***

11:30 **В. В. Алексеенко** (ИРНИТУ, Иркутск) — Микроскопический механизм перемещения атомов сверхтекучей фазы.
12:15 **Р. А. Подаров** (МТЦ СО РАН, Новосибирск) — Кинетика спиновой поляризации триплетов Zn-порфиринов замедляется на порядок при почти неизменных параметрах расщепления в нулевом поле.

13:00 – 14:00 **Обеденный перерыв**

◆ **Председатель секции: академик РАН К. М. Салихов**
(КФТИ им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

14:00 – 15:15 ***Круглые столы: результаты мастерских. 45 минут на задачу: доклад и обсуждение.***

14:00 **Е. Р. Кочаровская, В. В. Кочаровский** (ИПФ РАН, Нижний Новгород) — Коллективные моды в модели трёх связанных ансамблей активных центров (спиновых или атомных) в низкодобротном резонаторе.
14:45 **Подведение итогов мастерских**.

15:15 – 15:45 **Перерыв,** кофе

◆ **Председатель секции: А. С. Мельников, д.ф.-м.н.**
(МФТИ, Москва; заведующий отделом физики сверхпроводников ИФМ РАН, Нижний Новгород)

15:45–16:45 ***Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы***

15:45 **Э. Б. Фельдман** (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка) — Уравнение Линдблада в спиновой динамике и квантовом компьютинге.
16:05 **А. И. Смирнов** (академик РАН, ИФП им. П. Л. Капицы РАН, Москва) — Коллективные моды квантово-разупорядоченных магнетиков.
16:25 **А. В. Иванов** (ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, Москва) — Уравнения корреляционной магнитодинамики.

16:45 – 17:00 **Перерыв**

◆ **Председатель секции: член-корреспондент РАН И. В. Колоколов**
(ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка)

17:00 – 18:00 ***Устные доклады, 15 минут доклад + 5 минут вопросы.***

17:00 **В.И. Волков** (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка) — Возможности магнитного резонанса в исследовании синтетических и биологических мембран.
17:20 **В. Ф. Лебедев** (ГУАП, Санкт-Петербург) — Первый импульсный лазер на NV⊠, C-HPHT алмазе без внешнего резонатора.
17:40 **С. Р. Сверчков** (Сибирское отделение РАН, Новосибирск) — Октонионные модели квантовой запутанности.

18:00 – 21:00 ***Вечерний дискуссионный клуб***

◆ **Вторник, 3 ноября — Закрытие симпозиума | Юбилей**
Академия наук РТ, ул. Баумана, д. 20

◆ **Председатель секции: академик РАН А. И. Смирнов**
(ИФП им. П.Л. Капицы РАН, Москва)

9:30 – 9:40 **Вступление**

9:40 – 10:05 Квантовые и классические эффекты в динамике сверхизлучающих лазеров — **В. В. Кочаровский**, академик РАН, заведующий отделом астрофизики и физики космической плазмы ИПФ РАН, Нижний Новгород.

10:05 – 10:30 Квантовая динамика вихрей в сверхпроводниках — **А. С. Мельников**, д.ф.-м.н., МФТИ, Москва; главный научный сотрудник, заведующий отделом физики сверхпроводников ИФМ РАН, Нижний Новгород.

10:30 – 10:55 Флуктуации и когерентные вихри в двумерной турбулентности — **И. В. Колоколов**, член-корреспондент РАН, директор ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН.

10:55 – 11:15 **Перерыв**

◆ **Председатель секции: академик РАН В. В. Кочаровский**
(ИПФ РАН, Нижний Новгород)

11:15 – 11:40 От единичного квантового излучателя к функциональной архитектуре в инженерии нанообъектов: методы сверхвысокого разрешения, прецизионного синтеза и нанолитографии — **А. В. Наумов**, член-корреспондент РАН, руководитель Троицкого обособленного подразделения ФИАН, Москва, Троицк.

11:40 – 12:05 Стрела времени в метастабильной Вселенной — **В. В. Бражкин**, академик РАН, директор ИФВД им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк (онлайн).

◆ **12:05 – 12:30** ***Итоги симпозиума. Принятие Казанского меморандума.***

12:30 – 14:00 **Обеденный перерыв**

◆ **14:00 – 16:00** ***Юбилейная программа по случаю 90-летия академика Российской академии наук Кева Минуллиновича Салихова***
Председатель: член-корреспондент РАН А. А. Калачев (ФИЦ КазНЦ РАН, Казань)

Тезисы докладов

в порядке программы симпозиума

Оглавление

Тезисы докладов

Пятница, 30 октября

К. М. Салихов. Кинетические уравнения: зачем они нужны, откуда они берутся?.....9

М. П. Гениман и др. Кинетические уравнения релаксации долгоживущих ядерных спиновых состояний при обратимом связывании лиганда с белком.....11

А. И. Иванов и др. Кинетика матрицы плотности возбуждённых октупольных молекул: от вибронной когерентности к «встречному вращению» гармоник.....12

П. А. Французов. Загадка мерцания нанокристаллов: от удивительного явления до кинетических уравнений.....13

Суббота, 31 октября

С. В. Демишев. Что мы знаем, и чего мы не знаем об уравнении Ландау–Лифшица–Гильберта?.....14

М. Г. Васин. Вывод уравнений Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта в представлении спинов майорановскими спинорами.....15

Е. В. Радионычев. Применение квантовых кинетических уравнений для описания эффектов резонансного мёссбауэровского взаимодействия фотонов с энергией 14,4 кэВ с ядрами ^{57}Fe.....16

К. Б. Циберкин и др. Проявления хаотизации и термализации спиновых структур конечной размерности.....17

Л. Р. Тагиров. Обменное сужение линий ЭПР в сверхпроводниках: роль пространственных масштабов.....19

Д. С. Рыбин. Кинетика деформационно-индуцированных реакций: от дискретного анализа к мониторингу в реальном времени.....20

К. И. Герасимов и др. Суперфлуоресценция и сверхизлучательная лазерная генерация в монокристалле $YPO_4:Er^{3+}$ на длине волны телекоммуникационного диапазона.....21

Р. В. Ли и др. Квантово-полевой подход к кинетике многостадийных химических реакций в жидкостях: создание полностью модифицированной теории встреч (СМЕТ).....22

Воскресенье, 1 ноября

К. Ш. Муртазаев и др. Исследование критических свойств антиферромагнитных систем методом Монте-Карло и машинным обучением.....23

К. П. Сидоров. Разделение временных масштабов в модели теплообменника для диагностики загрязнения поверхности теплообмена.....24

А. М. Агаларов и др. Солитоны, оптические димеры и алгоритмы искусственного интеллекта в рое роботов.....25

Ж. Х. Пулотов и др. Влияние композиционных трансформаций на магниторезонансные свойства гетероструктур $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$.....26

Н. Х. Усеинов. От спиновой динамики электронов в магнитном туннельном контакте до спин-поляризованного тока.....27

И. А. Фролов и др. От квантового уравнения для матрицы плотности к основному уравнению спиновой химии.....28

К. М. Салихов. Новая парадигма спинового обмена и его проявлений в ЭПР-спектроскопии.....29

Понедельник, 2 ноября

Г. А. Бочкин, Э. Б. Фельдман. Квантовая запутанность в двухспиновой системе (s = 1/2) с диполь-дипольным взаимодействием и химическим обменом.....31

А. И. Смирнов. Коллективные моды квантово-разупорядоченных магнетиков.....32

А. В. Иванов, А. В. Лукьянов. Уравнения корреляционной магнитодинамики.....33

В. И. Волков. Возможности магнитного резонанса в исследовании синтетических и биологических мембран.....34

В. Ф. Лебедев и др. Первый импульсный лазер на NV^-,C:HPHT-алмазе без внешнего резонатора.....35

Вторник, 3 ноября

Р. Кинзибаев и др. Квантовая динамика вихрей в сверхпроводниках.....36

И. В. Колоколов. Флуктуации и когерентные вихри в двумерной турбулентности.....37

А. В. Наумов. От единичного квантового излучателя к функциональной архитектуре в инженерии нанообъектов: методы сверхвысокого разрешения, прецизионного синтеза и нанолитографии.....38

В. В. Бражкин. «Стрела времени» в метастабильной Вселенной.....39

Вне программы

Н. К. Соловаров. Квантовая когерентность состояний Белла.....40

Е. С. Мещерякова и др. 2,2-Дифенил-4-метил- и 5-метил-1,3-диоксаны: геометрия, топологические параметры, упаковка в кристаллах и стереоэлектронные эффекты.....41

Постановки задач для мастерских

Н. Л. Асфандиаров и др. Существует ли интерференция каналов выброса электронов из молекулярных отрицательных ионов?..... 43

В. Ф. Лебедев. Формулировка и решение системы скоростных уравнений в системе NV^-–C-центров в HPHT-алмазе: создание инверсии населённостей и лазерная генерация.....44

Р. В. Ли. Квантовое измерение как немарковский процесс: поиск кинетического уравнения с памятью об истории коллапсов.....45

Результаты мастерских

Н. Л. Асфандиаров и др. Существует ли интерференция каналов выброса электронов из молекулярных отрицательных ионов?..... 48

Р. А. Подаров и др. Кинетика спиновой поляризации триплетов Zn-порфиринов замедляется на порядок при почти неизменных параметрах расщепления в нулевом поле.....50

Пятница, 30 октября · 10:20 · вступительный доклад

Кинетические уравнения: зачем они нужны, откуда они берутся?

К. М. Салихов

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань
kevsalikhov@mail.ru

Движение одной частицы описывают уравнение Ньютона $m\,\mathrm{d}V/\mathrm{d}t = F$ и уравнение Шрёдингера $\partial\Psi/\partial t = -(i/\hbar)H\Psi$. Для ансамбля из очень большого числа взаимодействующих частиц эти уравнения практически не решить. Да и решение мало что дало бы: у каждого прибора есть разрешение по времени, и регистрирует он среднее по своему окну. При разрешении в микросекунду измеряется среднее за микросекунду; мгновенное флуктуирующее значение прибору недоступно. Нужны уравнения движения для самих измеряемых величин (намагниченности, поляризации, концентрации, тока).

Такие уравнения даёт статистическая механика. Вводится плотность распределения вероятности $f(\Gamma, t)$ найти систему в точке Γ её фазового пространства; для неё выполняется уравнение непрерывности

$$\partial f(\Gamma, t)/\partial t + \operatorname{div} \mathbf{j}(f(\Gamma, t)) = 0, \qquad (1)$$

где $\mathbf{j}$ — поток. Изменение f в ячейке складывается из явной зависимости от времени (например, меняющееся внешнее поле) и из потоков: частицы переходят из ячейки в ячейку.

Далее доклад следует теории Н. Н. Боголюбова [1]. Главный вопрос: как и когда, стартуя с уравнения Лиувилля для функции распределения или с квантового уравнения движения для матрицы плотности, можно получить кинетическое уравнение для измеряемых в опыте величин? Макроскопические величины вычисляются, если известны функции распределения для одной и двух частиц. Они входят в цепочку зацепляющихся уравнений ББГКИ: одночастичная функция f_1 зацепляется за двухчастичную f_{12}, та за трёхчастичную, и так далее. Все уравнения цепочки линейны, поэтому их решениями будут и суперпозиции решений. Первое уравнение цепочки, $\partial f_1/\partial t = Lf_1 + Wf_{12}$ с линейными операторами L и W, замыкает гипотеза Боголюбова: многочастичные функции зависят от времени только через f_1, то есть для двухчастичной функции предполагается $f_{12} = Q(1, 2 \mid f_1(t))$. Получается кинетическое уравнение

$$\partial f_1/\partial t = Lf_1 + WQ(1, 2 \mid f_1). \qquad (2)$$

Написать его можно при одном условии: времена элементарных процессов разделены, и отношение длительности элементарного события τ_0 к интервалу между событиями τ_1 мало. Когда масштабы сходятся, кинетического уравнения нет, и это тоже результат. Для открытых систем общего уравнения движения не существует: для каждой системы его выводят заново, и вывести уравнение — значит рассчитать потоки. В разбавленном газе или растворе потоки создаются парными столкновениями, и выходит уравнение типа уравнения Больцмана; в концентрированной среде или при химических превращениях потоки выглядят совершенно иначе.

Порядок построения таков. Сначала механизм: какая необратимая кинетика наблюдается, какое взаимодействие и движение за неё отвечают, каковы времена по порядку величины. Затем модель, в которой следят за измеряемыми величинами, а остальное усредняют; малым параметром становится слабая связь системы с окружением. Затем вывод: теория возмущений, цепочка ББГКИ и схемы её расцепления. И проверка: уравнение обязано объяснить все имеющиеся экспериментальные данные. Уравнение, не прошедшее проверки, остаётся подгонкой. Пример — спиновый обмен в разбавленных растворах парамагнитных частиц [2]: уравнения для парциальных намагниченностей подансамблей спинов уже содержат обменное сужение спектра ЭПР, а коллективные моды получаются как их собственные векторы.

Уравнение, выведенное для конкретной открытой системы и прошедшее проверку, в своей области применимости такое же фундаментальное, как уравнения Ньютона и Шрёдингера в своей. Каждый учёный имеет право написать новое уравнение.

Литература

1. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. М.; Л.: Гостехиздат, 1946.

2. *Салихов К. М.* // УФН. 2019. Т. 189. С. 1017–1043.

Пятница, 30 октября · 11:30 · устный доклад

Кинетические уравнения релаксации долгоживущих ядерных спиновых состояний при обратимом связывании лиганда с белком

М. П. Гениман, А. М. Вопиловский, А. С. Кирютин, А. В. Юрковская, Н. Н. Лукзен

Институт «Международный томографический центр» СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия
luk@tomo.nsc.ru

Определение константы устойчивости комплекса, образуемого органическим лигандом с белком, является первым этапом скрининга новых лекарственных препаратов. Долгоживущие ядерные спиновые состояния, в частности синглетное состояние, могут использоваться для изучения обратимого связывания лигандов с белками. В комплексе с белком спины лиганда взаимодействуют со спинами белка, система ядер белка и лиганда может релаксировать по диполь-дипольному механизму, и время жизни синглетного состояния сильно сокращается. В данном теоретическом исследовании была решена система уравнений теории встреч с условием быстрой релаксации протонов белка для определения времени жизни долгоживущих состояний в присутствии белка. Было показано, что в пределе быстрого химического обмена релаксация долгоживущих состояний ядер лиганда, обусловленная дипольным взаимодействием с ядрами белка, сводится к релаксации по механизму дипольного взаимодействия с одним протоном белка, находящимся на некотором эффективном расстоянии от ядер лиганда. Были проведены численные расчёты для проверки применимости использованных приближений к обработке экспериментальных зависимостей времени жизни от концентрации лиганда и внешнего поля, и было показано, что эти приближения совпадают с пределом быстрого обмена в сильных и слабых магнитных полях, но не в среднем поле. Получено аналитическое выражение для времени жизни синглетного состояния ядер лиганда в произвольном магнитном поле в отсутствие белка.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 26-23-20115 и Соглашение с Министерством науки и инновационной политики Новосибирской области от 15.04.2026 г. № 30-2026-001278).

Пятница, 30 октября · 11:50 · устный доклад

Кинетика матрицы плотности возбуждённых октупольных молекул: от вибронной когерентности к «встречному вращению» гармоник

А. И. Иванов, В. К. Игнатьев, А. Е. Назаров

Волгоградский государственный университет, 400062 Волгоград, Россия

Исследуются плоские π-сопряжённые молекулы вида AD_3 (DA_3), где A и D — электрон-акцепторные и электрон-донорные группы. Вследствие C_3-симметрии нижние возбуждённые состояния являются вырожденными и имеют большой электрический дипольный момент. Кроме этого дублета есть ещё близко расположенное полносимметричное состояние с нулевым дипольным моментом. В результате возникают эффект и псевдоэффект Яна–Теллера. Исходная вибронная задача для октупольной молекулы описывает сложную связанную динамику электронов и ядер с частотами $\omega \sim 10^{14}$ с$^{-1}$. Благодаря большому дипольному моменту такие молекулы сильно взаимодействуют с электромагнитным полем. Для молекул с сильным вибронным взаимодействием показано, что прибор при наложении электромагнитного поля должен регистрировать медленный отклик поляризации в терагерцовой или СВЧ-области, определяемый туннельным расщеплением. Для связи этих масштабов мы применяем формализм кинетического уравнения Лиувилля.

Анализ решения показал, что отклик поляризации на переменное электрическое поле кардинально различается для разных гармоник. Первая гармоника возникает вследствие квантовой суперпозиции стационарных состояний (в отсутствие поля) и всегда коллинеарна полю. Нулевая и вторая гармоники рождаются из-за медленной релаксации населённостей и подчиняются неочевидному закону поворота: $\beta = \pi - 2\gamma$, где γ — угол поляризации электромагнитного поля, β — угол поляризации отклика.

Значение для эксперимента. С использованием кинетической модели показано, что, поворачивая поляризатор (γ) относительно молекулярных осей, можно добиться ортогональности первой и второй гармоник поляризации. Это позволяет разделить вклады в эксперименте без сложной фильтрации — то есть кинетика не просто описывает, но и предлагает метод измерения, ранее недоступный в рамках чисто квантовых моделей.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-13-00180-П, https://rscf.ru/project/22-13-00180/.

Литература

1. *Nazarov A. E., Ignatjev V. K., Ivanov A. I.* Jahn–Teller-driven electric field response in excited octupolar molecules // J. Chem. Phys. 2025. V. 163. 244301. https://doi.org/10.1063/5.0305597
2. *Nazarov A. E., Ignatjev V. K., Ivanov A. I.* Terahertz second-harmonic generation by excited octupolar molecules // J. Chem. Phys. 2026. V. 164. 154303. https://doi.org/10.1063/5.0331932

Пятница, 30 октября · 12:10 · устный доклад

Загадка мерцания нанокристаллов: от удивительного явления до кинетических уравнений

П. А. Французов

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Мы проследим методику построения теории на примере явления мерцания наночастиц. Мерцанием называются флуктуации интенсивности фотолюминесценции одиночных наночастиц, таких как коллоидные полупроводниковые квантовые точки, наностержни, перовскитные нанокристаллы и др., находящихся под непрерывным облучением внешним источником света. Удивительным является то, что эти флуктуации не имеют масштабов времени, то есть флуктуации наблюдаются на временах порядка миллисекунд, секунд, тысяч секунд и даже часов.

Мы рассмотрим в исторической перспективе, как создавалась количественная теория мерцания одиночных коллоидных полупроводниковых квантовых точек, включая следующие последовательные стадии:

1. Сбор и анализ экспериментальных данных;
2. Выдвижение возможных физических механизмов явления;
3. Создание моделей на основе предложенных механизмов;
4. Формулировка кинетических уравнений для соответствующих моделей;
5. Моделирование свойств мерцания с использованием кинетических уравнений и сравнение его результатов с экспериментом.

Суббота, 31 октября · 13:30 · устный доклад

Что мы знаем, и чего мы не знаем об уравнении Ландау–Лифшица–Гильберта?

С. В. Демишев

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Уравнение квазиклассической спиновой динамики, получившее в литературе название «уравнение Ландау–Лифшица–Гильберта» (ЛЛГ) [1], может рассматриваться как полезное для практических применений. Например, с его помощью осуществляется микромагнитное моделирование различных приборов и устройств спинтроники. Другой областью применения уравнения ЛЛГ может служить расчёт мод собственных и вынужденных магнитных колебаний в различных сложных системах, когда прямое использование точного квантово-механического расчёта затруднено или невозможно. Ещё одним преимуществом уравнения типа ЛЛГ является возможность простого количественного учёта магнитных флуктуаций (в том числе квантовых) [2], что позволяет эффективно применять квазиклассический подход для описания электронного парамагнитного резонанса в сильно коррелированных системах.

Однако в данной области существует несколько фундаментальных проблем. Во-первых, в строгом смысле единого уравнения ЛЛГ не существует, причём уравнение Ландау–Лифшица (ЛЛ) и уравнение Гильберта (Г) не могут быть в общем случае корректно объединены в одно уравнение без потери физического смысла [2]. Во-вторых, релаксационные члены ЛЛ и Г описывают разные механизмы магнитной релаксации, что ведёт к качественно и количественно отличающимся результатам расчётов, например в случае электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [2,3]. В такой ситуации уместно задаться вопросом, какой именно тип релаксации лучше всего соответствует экспериментальной ситуации? Оказывается, что наиболее адекватное описание ЭПР в сильно коррелированных электронных системах соответствует уравнению Ландау–Лифшица, а не уравнению Гильберта. Этот факт нетривиален, поскольку в случае уравнения ЛЛ релаксация перенормирует частоту внешнего переменного поля ω, а в случае уравнения Г — частоту вращения вектора намагниченности $\omega_{\text{н}}$. Учитывая, что уравнения ЛЛ и Г соответствуют квантовой двухуровневой системе со спином $S = 1/2$ [1], именно $\omega_{\text{н}}$ задаёт уровни системы, которые будет «уширять» релаксация. С этой точки зрения уравнение Гильберта гораздо более «физично» по сравнению с уравнением Ландау–Лифшица, в то время как эксперимент говорит о том, что ситуация оказывается обратной, по крайней мере для некоторого класса экспериментальных объектов.

Данное противоречие до сих пор не получило должного исследования и может быть классифицировано как фундаментальная «загадка» обоснования квазиклассического описания спиновой динамики. Без её решения нельзя, в частности, получить ответ на вопрос о том, в какой мере результаты описания с помощью уравнений ЛЛ и Г могут быть использованы для решения задач практического конструирования и предсказания характеристик различных устройств.

Работа поддержана грантом РНФ № 22-12-00008-П.

Литература

1. *Skrotskii G. V.* // Sov. Phys. Usp. 1984. V. 27. P. 977.
2. *Demishev S. V.* // Appl. Magn. Reson. 2024. V. 55. P. 1091.
3. *Popov A. V., Demishev S. V.* // Appl. Magn. Reson. 2026. V. 57. P. 21.

Суббота, 31 октября · 13:50 · устный доклад

Вывод уравнений Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта в представлении спинов майорановскими спинорами

М. Г. Васин

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова (ФГУП «ВНИИА»), 127030 Москва, Россия

Метод кинетических уравнений является эффективным инструментом для описания открытых систем — от химической кинетики до молекулярной динамики и физики конденсированного состояния. Настоящий доклад посвящён применению этого подхода к одной из фундаментальных задач физики магнетизма — описанию динамики спина.

В докладе будет показано, как спинорный формализм [1,2], естественно возникающий из квантовой механики, позволяет перейти от микроскопического гамильтониана к макроскопическим уравнениям движения намагниченности — уравнению Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта. Представление спина майорановскими спинорами даёт компактный и последовательный способ учёта как прецессии во внешнем поле, так и релаксационных процессов, ответственных за установление равновесия [2,3]: прецессия спина во внешнем поле — это унитарная эволюция спинора, а релаксация — добавление необратимой динамики. Переходя от спинора к среднему спину $\langle \mathbf{S} \rangle$, мы естественно получаем уравнение Ландау–Лифшица: спинор даёт микроскопическую основу, а уравнение движения намагниченности — макроскопический результат.

Вывод уравнений Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта из кинетики спиноров демонстрирует, каким образом квантовые свойства отдельной частицы (спина) приводят к наблюдаемой коллективной динамике магнитного момента — величине, измеряемой в эксперименте. Таким образом, кинетические уравнения, записываемые в спинорном формализме, — это не просто формальный приём, а единый язык, связывающий квантовую динамику с макроскопическим описанием открытых систем. Уравнения Ландау–Лифшица и Ландау–Лифшица–Гильберта являются при этом конкретным примером общего принципа: макроскопические законы определяются квантовой динамикой частиц через кинетическое усреднение.

Литература

1. *Tsvelik A. M.* New fermionic description of quantum spin liquid state // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 69. P. 2142–2144.
2. *Schad P., Makhlin Y., Narozhny B., Schön G., Shnirman A.* Majorana representation for dissipative spin systems // Ann. Physics. 2015. V. 361. P. 401–422.
3. *Vasin M. G., Remizov S. V., Elistratov A. A.* Critical dynamics of the spin–boson model // Physica A. 2026. 131835.

Суббота, 31 октября · 14:30 · устный доклад

Применение квантовых кинетических уравнений для описания эффектов резонансного мёссбауэровского взаимодействия фотонов с энергией 14,4 кэВ с ядрами ^{57}Fe

Е. В. Радионычев

Институт прикладной физики им. А. В. Гапонова-Грехова РАН, 603950 Нижний Новгород, Россия

В докладе рассказывается, как полученные докладчиком с соавторами квантовые кинетические уравнения для матрицы плотности [1], аналогичные широко применяемым в лазерной физике оптическим уравнениям Блоха, позволили предсказать целый ряд наблюдаемых квантовых эффектов резонансного мёссбауэровского взаимодействия одиночных гамма/рентгеновских фотонов с энергией 14,4 кэВ с ядрами ^{57}Fe. Среди них — эффект преобразования однофотонного волнового пакета, излучаемого радиоактивным источником ^{57}Co либо синхротронным мёссбауэровским источником Европейского центра синхротронного излучения (ESRF), в почти спектрально ограниченные короткие однофотонные импульсы [2–6], акустически индуцированная прозрачность среды резонансных ядер ^{57}Fe для фотонов с энергией 14,4 кэВ [7,8], создание почти произвольных временных форм однофотонного волнового пакета с энергией 14,4 кэВ [9]. Первые два из перечисленных эффектов были продемонстрированы экспериментально [2–4,7].

Литература

1. *Radeonychev Y. V., Tokman M. D., Litvak A. G., Kocharovskaya O.* Acoustically induced transparency in optically dense resonance medium // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. 093602.
2. *Vagizov F., Antonov V., Radeonychev Y. V., Shakhmuratov R. N., Kocharovskaya O.* Coherent control of the waveforms of recoilless γ-photons // Nature. 2014. V. 508. P. 80.
3. *Shakhmuratov R. N., Vagizov F. G., Antonov V. A., Radeonychev Y. V., Scully M. O., Kocharovskaya O.* Transformation of a single-photon field into bunches of pulses // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. 023836.
4. *Stejskal A., Vrba V., Procházka V.* Toward flexible intensity control of resonantly scattered γ-rays using multi-frequency vibrating resonant absorber // Appl. Phys. Lett. 2025. V. 126. 084102.
5. *Khairulin I. R., Antonov V. A., Radeonychev Y. V., Kocharovskaya O.* Ultimate capabilities for compression of the waveform of a recoilless γ-ray photon into a pulse sequence in an optically deep vibrating resonant absorber // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. 043860.
6. *Khairulin I. R., Radeonychev Y. V., Kocharovskaya O.* Compression of the Synchrotron Mössbauer X-ray Photon Waveform in an Oscillating Resonant Absorber // Photonics. 2022. V. 9. 829.
7. *Radeonychev Y. V., Khairulin I. R., Vagizov F. G., Scully M., Kocharovskaya O.* Observation of acoustically induced transparency for γ-ray photons // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124. 163602.
8. *Khairulin I. R., Radeonychev Y. V., Antonov V. A., Kocharovskaya O.* Acoustically induced transparency for synchrotron hard x-ray photons // Scientific Reports. 2021. V. 11. 7930.
9. *Khairulin I. R., Radeonychev Y. V.* On-demand acoustic shaping of Mössbauer γ-ray photons // Phys. Rev. A. 2025. V. 111. 023713.

Суббота, 31 октября · 15:30 · устный доклад

Проявления хаотизации и термализации спиновых структур конечной размерности

К. Б. Циберкин, Е. И. Ковычева, В. К. Хеннер

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь
kbtsiberkin@psu.ru

Хаотическая динамика ансамблей магнитных частиц под воздействием внешних полей широко изучается в связи с фундаментальными вопросами переходов к хаосу и термализации магнетиков и ансамблей осцилляторов [1–3]. Кроме того, важны приложения к общей теории магнитного резонанса и релаксации [4,5]. Определение границ устойчивости регулярных динамических режимов значимо для развития технологий записи и хранения информации на современных носителях [6]. В перспективе оно позволит также минимизировать влияние декогеренции состояний, обусловленной дипольными взаимодействиями в ансамблях кубитов [7–9].

Эффективной моделью таких систем являются одномерные цепочки частиц благодаря относительной простоте их геометрии, что позволяет эффективно проводить как численное, так и аналитическое исследование. Известны также конкретные физические примеры схожих структур, например ансамбли NV^--центров в алмазах, вакансии в SiC и дефекты в гексагональном нитриде бора hBN [8], цепочечные структуры ядер H и F в гидроксиапатите $Ca_5(PO_4)_3OH$, фторапатите $Ca_5(PO_4)_3F$, гамбергите Be_2BO_3OH и др. [9].

Численное моделирование динамики цепочки классических магнитных моментов [10], находящейся в постоянном поле и пребывающей в начальный момент в неравновесном состоянии, показывает, что при увеличении амплитуды начального возмущения (иными словами, внесённой в систему энергии) возможен переход между двумя основными динамическими режимами [11]. При малой энергии начального состояния в цепочке реализуются бегущие волны с узким спектром суммарной намагниченности. Пространственные Фурье-спектры демонстрируют циклический обмен энергией между различными собственными модами колебаний, аналогично задаче Ферми–Паста–Улама–Цингоу [12]. Это происходит за счёт нелинейности связи частиц.

С другой стороны, возмущение с достаточно большой энергией (начальная поперечная намагниченность более 0,5) приводит к проявлению спин-спиновой релаксации, вызванной накоплением различия фазы прецессии отдельных частиц и снижением суммарной намагниченности системы. Это связано с замедлением распространения возмущений локальной намагниченности. Анализ пространственных мод колебаний показывает, что амплитуды как длинных, так и коротких волн становятся близкими по величине — картина близка к равнораспределению по степеням свободы. Хаотичность динамики подтверждается положительным значением старшего показателя Ляпунова и высокой чувствительностью системы к начальным условиям [13].

Результаты классического моделирования сопоставлены с прямым решением квантово-механической задачи спиновой динамики. Здесь, несмотря на общую ресурсозатратность, относительно малый размер системы позволяет проводить моделирование и аналитические расчёты без существенных дополнительных приближений. Метод базируется на рассмотрении эволюции суперпозиции чистых состояний, которые вычисляются посредством полной диагонализации матрицы спинового гамильтониана с построением всех собственных значений и векторов [14]. Они далее используются для нахождения сигнала намагниченности и расчёта её автокорреляционных функций.

Показано, что при числе частиц в кластере более 4 происходит переход от периодического колебательного режима к динамике, качественно подобной спин-спиновой релаксации. В модели на базе чистых состояний, тем не менее, сигнал при рассмотренных значениях параметров остаётся периодическим, что следует из вида автокорреляционных функций, а также, очевидно, линейности квантовой задачи. Период сигнала, однако, увеличивается по мере роста размерности спинового кластера. Развитие релаксационной динамики не зависит от геометрии структуры и связано только с размерностью фазового пространства моделируемой системы [15,16].

Дополнительно выполнено сравнение zz- и секулярного приближений. Найдено, что первое, исключающее вклады поперечных компонент магнитных моментов в общую энергию системы, демонстрирует повышенную автокорреляцию сигнала намагниченности на интервалах длительностью до нескольких времён релаксации, что может привести к недостоверной оценке когерентности состояний при моделировании спиновых кубитов. Условия перехода к релаксационной динамике соответствуют порогу установления квазипериодической динамики с дальнейшей хаотизацией систем классических магнитных моментов, установленному в известных численных работах. Особенности динамики секулярного приближения в большей степени отвечают поведению цепочек.

Литература

1. *Алексеев К. Н. и др.* // УФН. 1992. Т. 162, № 7. С. 81–118.
2. *Шутый А. М., Семенцов Д. И.* // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106, № 5–6. С. 334–342.
3. *Elsayed T. A., Hess B., Fine B. V.* // Phys. Rev. E. 2014. V. 90. 022910.
4. *Santos L. F., Borgonovi F., Izrailev F. M.* // Phys. Rev. E. 2012. V. 85. 036209.
5. *Боднева В. Л., Лундин А. А.* // ЖЭТФ. 2013. Т. 143, № 6. С. 1217–1224.
6. *Montoya E. A. et al.* // Nat. Commun. 2019. V. 10. 543.
7. *Cerletti V. et al.* // Nanotechnology. 2005. V. 16. R27.
8. *Onizhuk M., Galli G.* // Rev. Mod. Phys. 2025. V. 97. 021001.
9. *Bochkin G. A., Fel’dman E. B., Vasil’ev S. G.* // Appl. Magn. Reson. 2022. V. 53. P. 1439–1448.
10. *Henner V. K., Klots A., Belozerova T.* // Eur. Phys. J. B. 2016. V. 89. 264.
11. *Циберкин К. Б.* // Вестник ПГУ. Физика. 2026. № 1. С. 43–51.
12. *Gallavotti G.* The Fermi–Pasta–Ulam Problem: a Status Report. Berlin: Springer, 2007.
13. *Henner V., Nepomnyashchy A., Belozerova T.* // Phys. D. 2026. V. 493. 135251.
14. *Henner V. et al.* // Appl. Magn. Reson. 2021. V. 52. P. 859.
15. *Ковычева Е. И., Циберкин К. Б.* // Вестник ПГУ. Физика. 2022. № 2. С. 26–35.
16. *Циберкин К. Б., Ковычева Е. И., Хеннер В. К.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2025. Т. 89. С. 1518–1525.

Суббота, 31 октября · 15:50 · устный доклад

Обменное сужение линий ЭПР в сверхпроводниках: роль пространственных масштабов

Л. Р. Тагиров

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань
ltagirov@mail.ru

Для описания кинетических явлений в термодинамике конденсированных сред общеприменимой является концепция иерархии временны́х масштабов. В простейшем случае сильно связанные степени свободы быстро приходят к квазиравновесию на коротких временах, формируя подсистемы. Те, в свою очередь, гораздо слабее взаимоде́йствуют друг с другом, стремясь к равновесию на гораздо более длинных временах. Временна́я эволюция во второй фазе (их может быть больше) формулируется на языке кинетических уравнений.

Обменное сужение дипольно и/или неоднородно уширенных линий электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), а также линий, имеющих тонкую или сверхтонкую структуру, принято описывать на языке кинетических уравнений для компонент намагниченности, индуцируемых или затрагиваемых микроволновым возбуждением. В стандартной ситуации, когда обменное сужение сильное (скорость обменных перескоков, то есть частота обменных флуктуаций, превышает спектральную ширину линии), линия приобретает симметричную лоренцеву форму с шириной значительно меньшей по сравнению с (ожидаемой) спектральной шириной (структурой) исходной линии. Как правило, дальнодействие обменного взаимодействия в большинстве твердотельных систем сопоставимо или меньше пространственного масштаба (диполь-дипольного, например), на котором формируется исходная ширина или структура линии, и ограничивается несколькими координационными сферами.

ЭПР на парамагнитных примесях, намеренно внедрённых в сверхпроводящую (СП) металлическую матрицу в концентрации до нескольких атомных процентов, также обнаруживает обменное сужение в нормальном состоянии, однако при переходе в сверхпроводящую фазу ширина линии значительно уменьшается [1], хотя ожидается увеличение ширины линии из-за эффектов СП-когерентности в одночастичной релаксации и неоднородности проникновения магнитного поля в сверхпроводник (вихри Абрикосова). Форма обменно-суженной линии также искажается.

Аккуратное рассмотрение показывает, что при переходе образца в СП-состояние между магнитными моментами парамагнитных примесей возникает новое обменное взаимодействие с дальнодействием порядка сверхпроводящей длины когерентности [2] — типично десятки нанометров, что абсолютно превышает любой пространственный масштаб уширения линии, кроме неоднородности магнитного поля. Кинетические уравнения, записанные для поперечной намагниченности неоднородно уширенной линии ЭПР, позволяют прояснить физику дополнительного сужения: в нормальной фазе степень обменного сужения линии ЭПР определяется свёрткой спектральной плотности обменных флуктуаций с контуром исходной формы линии на частоте резонанса [3, 4]. Из-за огромного дальнодействия сверхпроводящего обмена он не даёт вклада в ширину распределения спектральной плотности обменных флуктуаций (входит квадрат матричного элемента обменного взаимодействия), зато он сдвигает распределение на величину локального обменного поля, создаваемого дальнодействующим сверхпроводящим обменом (намагниченность «спинового пакета» не коммутирует с гамильтонианом скалярного обмена). В результате линия сужается. Форма линии искажается и может быть расщеплена на поглощение и дисперсию. Электродинамика сверхпроводника вносит дополнительный вклад дисперсии [4].

Литература

1. *Алексеевский Н. Е., Гарифуллин И. А., Кочелаев Б. И., Харахашьян Э. Г.* // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. С. 1523.
2. *Кочелаев Б. И., Тагиров Л. Р., Хусаинов М. Г.* // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. С. 578; 1980. Т. 79. С. 333.
3. *Кочелаев Б. И., Тагиров Л. Р.* // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. С. 1358–1370.
4. *Tagirov L. R.* // IEEE Trans. Magn. 1987. V. 23. P. 2230–2232.

Суббота, 31 октября · 16:10 · устный доклад

Кинетика деформационно-индуцированных реакций: от дискретного анализа к мониторингу в реальном времени

Д. С. Рыбин

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск
dsrybin@udman.ru

Механохимия как наука о деформационно-индуцированных реакциях является мощным инструментом создания новых материалов. Однако устойчивое развитие механохимических технологий сдерживается недостаточным пониманием молекулярных механизмов и кинетики твердофазных реакций, а также отсутствием эффективных алгоритмов масштабирования. Традиционные экспериментальные кинетические исследования в механохимии преимущественно основаны на дискретном режиме: реакционную смесь периодически выгружают, пробу готовят и анализируют. Такой подход имеет принципиальные ограничения. Во-первых, отбор пробы и остановка реактора вносят дополнительные возмущающие параметры — изменение температуры, давления, разгерметизацию рабочей зоны, — которые искажают истинное состояние системы. Во-вторых, дискретный анализ не позволяет регистрировать промежуточные состояния непосредственно в ходе механической обработки. В-третьих, он даёт усреднённую по времени и объёму картину, обладает низким временным разрешением и принципиально не способен непрерывно проследить последовательность структурных превращений. Поэтому актуальной задачей является создание механохимических реакторов со встроенными мультиспектральными методами контроля *operando*, а также математического аппарата, извлекающего кинетическую информацию из динамических спектров.

Особую роль в решении этой задачи может играть обобщённая двумерная корреляционная спектроскопия (2D-COS). Синхронный спектр выявляет спектральные координаты, изменения которых происходят одновременно, а асинхронный — последовательность и фазовый сдвиг изменений, тем самым позволяя восстановить порядок структурных превращений на субмолекулярном уровне — на уровне отдельных связей, функциональных групп и их локального окружения. Сочетание мультиспектрального мониторинга и корреляционного анализа в реальном времени открывает путь к управлению качеством твердофазного синтеза, включая фармацевтические приложения, и к масштабированию механохимических технологий.

В данной работе демонстрируется возможность разработки аппаратно-программного комплекса для исследования кинетики твердофазных химических реакций в условиях механохимического воздействия.

Созданный программно-аппаратный комплекс обеспечивает *in situ/operando* мониторинг кинетики деформационно-индуцированных реакций и переход от дискретного анализа к исследованию в реальном времени. Применение корреляционного анализа позволяет не только деконволюировать перекрывающиеся спектральные полосы без априорной информации, но и устанавливать последовательность реакционных превращений на субмолекулярном уровне. Развиваемый подход создаёт основу для управления механохимическим синтезом, оптимизации функциональных свойств композитных материалов и масштабирования механохимических технологий.

Суббота, 31 октября · 16:50 · устный доклад

Суперфлуоресценция и сверхизлучательная лазерная генерация в монокристалле $YPO_4:Er^{3+}$ на длине волны телекоммуникационного диапазона

К. И. Герасимов, М. М. Миннегалиев, И. В. Брекоткин, С. А. Моисеев

Казанский квантовый центр КНИТУ-КАИ, 420111 Казань, ул. К. Маркса, 10
kigerasimov@mail.ru

Сверхизлучение (СИ) Дике [1] ансамбля резонансных частиц, сосредоточенных в объёме меньшем, чем λ^3, или суперфлуоресценция (СФ) в системах большого объёма основаны на спонтанном появлении и усилении когерентности частиц в процессе их коллективного излучения. Этот процесс приводит к излучению мощного импульса или серии импульсов, интенсивность которых пропорциональна квадрату числа излучателей. При стационарной накачке может возникать и СИ лазерная генерация. Суперфлуоресценция обнаружена в разнообразных системах излучателей, например, в атомных и молекулярных газах, атомных пучках, твердотельных системах и холодных атомах в ловушках, в ансамбле примесных редкоземельных ионов (РЗИ) и других центрах в кристаллах [2,3], в которых выявлены многообразные свойства динамики взаимодействия света с когерентным ансамблем резонансных излучателей. Изучение этих свойств суперфлуоресценции стало предметом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований.

В настоящей работе обнаружены и исследованы данные когерентные явления в ансамбле ионов Er в кристалле YPO_4. При трёх длинах волн накачки изучены несколько режимов суперфлуоресценции: осцилляторная СФ и стационарная СИ лазерная генерация, возникновение «гигантских» импульсов СФ после выключения накачки, см. рис. 1. Генерируемые импульсы имели все характерные свойства СФ, причём исследования спектра контура усиления показали, что импульс СФ не полностью снимает инверсию населённости на СФ-переходе, и изучение его спектральных свойств позволяет получать важную информацию о свойствах квантовых переходов. С использованием системы уравнений Максвелла–Блоха проведено численное моделирование импульса СФ и получены динамические характеристики в трёхуровневой схеме. Реализована СИ лазерная генерация в твёрдом теле с узкой линией излучения (~ 48 кГц), в одномодовом одночастотном режиме работы, с высоким квантовым дифференциальным коэффициентом полезного действия (~ 84 %), низким порогом генерации (~ 0,34 мВт) и на телекоммуникационной длине волны (~ 1,5 мкм).

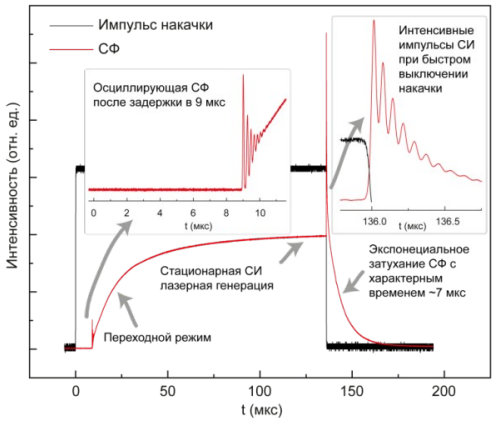


Рис. 1. Динамика СФ ионов Er в кристалле YPO_4.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (рег. № НИОКТР 125012300688-6).

Литература

1. *Dicke R. H.* Coherence in Spontaneous Radiation Processes // Phys. Rev. 1954. V. 93. P. 99–110.
2. *Kocharovsky V. V., Zheleznyakov V. V., Kocharovskaya E. R., Kocharovsky Vl. V.* Superradiance: the principles of generation and implementation in lasers // Uspekhi Fiz. Nauk. 2017. V. 187. P. 367–410.
3. *Men'shikov L. I.* Superradiance and related phenomena // Uspekhi Fiz. Nauk. 1999. V. 169. P. 113.

Суббота, 31 октября · 17:10 · устный доклад

Квантово-полевой подход к кинетике многостадийных химических реакций в жидкостях: создание полностью модифицированной теории встреч (CMET)

Р. В. Ли[1], О. А. Игошин[2], Е. Б. Криссинель[3], П. А. Французов[1]

[1] *Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск*
[2] *Department of Bioengineering, Department of BioSciences, Department of Chemistry and Center for Theoretical Biological Physics, Rice University, Houston, USA*
[3] *Research Complex at Harwell, Scientific Computing, Science and Technology Facilities Council, Didcot, OX11 0FA, United Kingdom*
roman.lithium@gmail.com

Актуальность и проблема. Реакционно-диффузионные процессы лежат в основе явлений от фотохимии до клеточной сигнализации. Классический закон действующих масс не учитывает пространственные корреляции частиц, возникающие при геминальной рекомбинации и в диффузионно-ограниченном режиме. Существующие теории (IET, MET) имеют ограниченную применимость и не дают корректных асимптотик, например $t^{-3/2}$ для $A + B \leftrightarrow C + D$, а также не воспроизводят корректную кинетику на малых временах.

Цель работы: разработать универсальную теорию кинетики многостадийных реакционно-диффузионных систем.

Методология и результаты. На основе формализма вторичного квантования и диаграммной техники выведены новые кинетические уравнения — полностью модифицированная теория встреч (CMET). Эта теория учитывает полный набор корреляций, воспроизводит точные степенные асимптотики и согласуется с ранее разработанными теориями в рамках их применимости.

Значение. CMET даёт строгий аппарат для моделирования кинетики в химической физике, биофизике, системной биологии и материаловедении (например, рекомбинация в перовскитах). Программа Tegro делает теорию доступной для исследователей, заменяя ресурсоёмкие симуляции многих частиц.

Литература

1. *Li R. V., Igoshin O. A., Krissinel E. B., Frantsuzov P. A.* Quantum field theory approach for multistage chemical kinetics in liquids // Phys. Rev. E. 2026. V. 114. 034111.

Воскресенье, 1 ноября · 13:30 · онлайн-сессия

Исследование критических свойств антиферромагнитных систем методом Монте-Карло и машинным обучением

К. Ш. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. Р. Джамалудинов, М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев

Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала

5kurban@mail.ru

В вычислительной физике и физике фазовых переходов большой интерес представляют исследования свойств спиновых систем с помощью численных методов [1,2]. В последние годы большой интерес представляют работы, исследующие спиновые системы с помощью нейронной сети. Имея большую базу данных, полученных методом Монте-Карло, можно достаточно качественно обучать нейронную сеть для дальнейшего использования [3].

В докладе будут представлены результаты исследования антиферромагнитных моделей на объёмно-центрированной кубической решётке при наличии конкурирующих обменных взаимодействий. Приведены результаты исследования рассматриваемых моделей при наличии внешнего магнитного поля.

Исследования выполнены на основе репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло, который является наиболее эффективным методом для исследования сложных спиновых систем с дополнительными взаимодействиями [4,5]. Также в работе приведены результаты, полученные с помощью обученной нейронной сети.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 25-12-20029.

Литература

1. *Diep H. T.* Frustrated Spin Systems. Singapore: World Scientific Publishing, 2004.
2. *Murtazaev K. Sh., Magomedov M. A., Ramazanov M. K.* // Physica B: Condensed Matter. 2025. 417822.
3. *Овчинников П. А., Московченко З. А., Цуранова М. Э.* // Письма в ЖЭТФ. 2026. Т. 122. Вып. 2.
4. *Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y.* // Biopolymers. 2001. V. 60, № 2. P. 96–123.
5. *Биндер К.* Методы Монте-Карло в статистической физике. М.: Мир, 1982.

Воскресенье, 1 ноября · 14:10 · онлайн-сессия

Разделение временных масштабов в модели теплообменника для диагностики загрязнения поверхности теплообмена

К. П. Сидоров

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск
Научный руководитель — В. П. Бурков, старший преподаватель ОНД ИШПР НИ ТПУ

Изменение выходных температур теплообменника может быть обусловлено колебаниями режима работы, тепловой инерцией аппарата и накоплением отложений. Поэтому отклонение измеренной температуры от стационарного расчётного значения не является однозначным признаком загрязнения. Для диагностики необходимо разграничить переходный тепловой процесс и изменение характеристик поверхности теплообмена.

Цель работы — сформулировать подход к сокращённому динамическому описанию теплообменника на основе разделения характерных времён переноса теплоносителя, тепловой релаксации стенки и накопления отложений.

Рассматривается теплообменник с однофазными теплоносителями. Измеряемыми величинами служат входные и выходные температуры, массовые расходы обоих потоков и перепады давления. Предлагаемая модель включает уравнения энергетического баланса теплоносителей и стенки, а также уравнение эволюции термического сопротивления отложений. Последнее учитывает результирующее действие осаждения и удаления загрязняющего вещества. Зависимости скоростей этих процессов от температуры, состава среды и условий течения необходимо определять для конкретного объекта.

Сокращение модели предлагается выполнять после оценки соотношения характерных времён. Если накопление отложений существенно медленнее теплового переходного процесса, их сопротивление можно считать постоянным на коротком интервале наблюдения. На этом интервале рассчитывается отклик аппарата на изменение входных параметров, а на более длительном — оценивается изменение сопротивления загрязнения. Исключение динамики стенки допустимо лишь при достаточно малом времени её тепловой релаксации относительно исследуемого процесса.

Диагностическим признаком предлагается использовать устойчивое рассогласование измеренных выходных температур с прогнозом модели, учитывающей режим работы и тепловую инерцию. Изменение перепада давления при сопоставимых расходах и свойствах теплоносителя рассматривается как дополнительный признак. При идентификации необходимо учитывать погрешности датчиков и неоднозначность решения: изменения коэффициентов теплоотдачи и сопротивления отложений могут вызывать близкие температурные отклики.

Проверку подхода предполагается провести вычислительным экспериментом. Планируется сопоставить сценарии изменения режима при неизменном состоянии поверхности и постепенного роста загрязнения. Критериями оценки станут ошибка прогноза температур, чувствительность к росту термического сопротивления и частота ложных срабатываний при переходных процессах.

Работа имеет постановочный характер. Ожидаемый результат — определение условий, при которых разделение временных масштабов позволяет упростить модель без потери диагностически значимой информации. Такая модель может стать расчётной основой цифрового двойника теплообменника для мониторинга технического состояния.

Воскресенье, 1 ноября · 14:30 · онлайн-сессия

Солитоны, оптические димеры и алгоритмы искусственного интеллекта в рое роботов

А. М. Агаларов[1], З. З. Алисултанов[1,2], Т. Т. Гаджимурадов[1]

[1] *Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*
[2] *Московский физико-технический институт, Москва, Россия*
aglarow@mail.ru

Оптический димер — пара связанных нитей световолокна с чередующимися участками усиления и потерь наноразмерного масштаба, кластер таких нитей — олигомер. Математическая модель световых димеров — дискретная и/или непрерывная система связанных нелинейных дифференциальных уравнений Шредингера. Многослойные структуры и устройства, такие как мультиплексоры и переключатели оптических сигналов (логических битов (солитонов)), играют ключевую роль в надёжности и защите передаваемой информации в системах волоконно-оптических линий связи (ВОЛС) и в ожидаемых компьютерных и нейроморфных технологиях. Эти устройства опто- и наноэлектроники выполняют задачи коммутации и блокировки информации, а также служат логическими элементами (квантовыми вентилями) с энергией переключения ∼ 6 пДж и менее и частотой ∼ 0,2 ТГц и более (находят применение также в датчиках-сенсорах и новых ИИ-устройствах, роботах медицины и техники).

Модель. Рассмотрим систему связанных нелинейных уравнений Шредингера для двух компонент:

$$i\psi_{1z} + \tfrac{1}{2}\psi_{1tt} + iR\psi_2 + a_1|\psi_1|^2\psi_1 = 0, \tag{1}$$

$$i\psi_{2z} + \tfrac{1}{2}\psi_{2tt} + iR\psi_1 + a_2|\psi_2|^2\psi_2 = 0, \tag{2}$$

где $\psi_i \in \mathbb{C}$, $i = (1, 2)$; $R, a, b \in \mathbb{R}^1$ — const.

Пусть $G_1(z, t) = \alpha \exp(\eta)$, $G_2(z, t) = -\alpha \exp(\eta)$,

$$\psi_{1,2} = \frac{G_j(z,t)}{F(z,t)}, \quad j = 1, 2.$$

$$F(z,t) = 1 + \frac{|\alpha|^2}{(Q+Q^*)^2}\, e^{\eta+\eta^*}, \tag{3}$$

где $\eta = Pz + Qt$, $P = \tfrac{1}{2}Q^2 - iR$, $\Delta = |\alpha|^2/(Q + Q^*)^2$.

В условиях (3) билинейным методом Хироты получаем **точное односолитонное решение** двухкомпонентного **векторного солитона** $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)$ [1,2]:

$$\Psi_1(t,z) = A_R \operatorname{sech}(\eta_R - \ln\Delta/2 + \varphi_1)\, e^{i\eta_I}, \tag{4}$$

$$\Psi_2(t,z) = -A_R \tanh(\eta_R - \ln\Delta/2 + \varphi_2)\, e^{i\eta_I}, \tag{5}$$

$$A_R = \operatorname{Re}(Q), \quad \eta_R = \operatorname{Re}(\eta), \quad \eta_I = \operatorname{Im}(\eta), \quad \varphi_i \ (i = 1, 2) \tag{6}$$

где φ_i (i = 1, 2) — сдвиг фаз. Здесь α, P и Q являются постоянными комплексными параметрами солитона ($\alpha, P, Q \in \mathbb{C}$).

Точное 2-солитонное решение в оптическом димере (1–2) получим из коэффициентов разложения функций G_i (i = 1, 2) и F в алгоритме (в билинейной схеме алгебры Хироты до ε^4-порядка):

$$R_0 \to \varepsilon^1 R_1 \to \varepsilon^2 R_2 \to \cdots \to \varepsilon^N R_N, \quad (R = G_1, G_2, F). \tag{7}$$

Литература

1. *Захаров В. Е., Манаков С. В., Новиков С. П., Питаевский Л. П.* Теория солитонов. М.: Наука, 1980.
2. *Agalarov A. M., Magomedmirzaev R. M.* Nontrivial class of composite U(σ+μ) vector solitons // JETP Letters. 2002. V. 76, № 7. P. 414–418.

Воскресенье, 1 ноября · 15:40 · устный доклад

Влияние композиционных трансформаций на магниторезонансные свойства гетероструктур $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$

Ж. Х. Пулотов[1], Б. Ф. Габбасов[1], И. В. Янилкин[1], А. И. Гумаров[1], А. Г. Киямов[1], Л. Р. Тагиров[1,2], Р. В. Юсупов[1]

[1] *Институт физики Казанского федерального университета, Казань*
[2] *Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань*
zhakpulotov@kpfu.ru

Слабые ферромагнетики $Pd_{1-x}Fe_x$ с содержанием железа до 12 ат. % представляют интерес для сверхпроводниковой спинтроники благодаря низкой температуре Кюри, малой намагниченности насыщения и невысокой коэрцитивной силе [1]. В настоящей работе исследовано влияние отжига на кристаллическую структуру и магниторезонансные свойства гетероструктур $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$.

Методом молекулярно-лучевой эпитаксии на MgO(001) синтезированы плёнки $Pd_{1-x}Fe_x$ толщиной 20 нм с x = 0,10 и 0,12 и гетероструктуры с платиной толщиной 12 нм [2]. Выбор Pt обусловлен сильным спин-орбитальным взаимодействием и близостью параметров решётки к $Pd_{1-x}Fe_x$ [3]. Образцы $Pd_{0,9}Fe_{0,1}/Pt$ и $Pd_{0,88}Fe_{0,12}/Pt$ отжигались при 800 и 600 °C соответственно в течение 1 ч.

Рентгеноструктурный анализ выявил до отжига раздельные рефлексы (002) слоёв Pt и Pd–Fe. После отжига при 800 °C наблюдается один промежуточный рефлекс, указывающий на полное взаимное растворение слоёв. При 600 °C сохраняются два смещённых рефлекса, что свидетельствует о частичном перемешивании на интерфейсе и формировании градиента состава. Все образцы монокристаллические, с эпитаксией «куб на кубе».

Исследования методом ферромагнитного резонанса проведены при 20 K на спектрометре Bruker ESP300 в X-диапазоне (∼10 ГГц). В конфигурации in-plane линия гетероструктуры шире примерно на 20 % по сравнению с однослойной плёнкой [4], что связано со спиновой накачкой. Сдвиг резонанса в большие поля в конфигурации out-of-plane обусловлен интерфейсным вкладом в анизотропию.

Отжиг при 800 °C приводит к десятикратному уширению линии, обусловленному локальной неоднородностью распределения Pd и Pt в окружении атомов Fe. Уменьшение разности резонансных полей in-plane и out-of-plane связано со снижением намагниченности вследствие уменьшения средней концентрации железа. При 600 °C уширение и сдвиги менее выражены, что согласуется с частичным перемешиванием и образованием градиентной области.

Литература

1. *Yanilkin I. V., Yusupov R. V. et al.* Epitaxial growth of $Pd_{1-x}Fe_x$ films on MgO single-crystal substrate // Thin Solid Films. 2019. V. 669. P. 338–344.
2. *Pulotov Zh. Kh., Kadikova A. Kh., Gabbasov B. F., Yanilkin I. V., Gumarov A. I., Kiiamov A. G., Tagirov L. R., Yusupov R. V.* Magnetoresonant properties and spin-Hall effects in epitaxial $Pd_{1-x}Fe_x$ and $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$ structures // Magnetic Resonance — Current State and Future Perspective (EPR-80): Book of abstracts. Kazan, 2024. P. 142–143.
3. *Sinova J., Valenzuela S. O., Wunderlich J. et al.* Spin Hall effects // Rev. Mod. Phys. 2015. V. 87. P. 1213–1260.
4. *Pulotov Zh. Kh., Kadikova A. Kh., Gabbasov B. F., Yanilkin I. V., Gumarov A. I., Kiiamov A. G., Tagirov L. R., Yusupov R. V.* Spin-Hall effects in epitaxial $Pd_{1-x}Fe_x/Pt$ and $Pd_{1-x}Fe_x/W$ thin film structures // Modern Development of Magnetic Resonance 2025: Book of abstracts. Kazan, 2025. P. 36–37.

Воскресенье, 1 ноября · 16:20 · устный доклад

От спиновой динамики электронов в магнитном туннельном контакте до спин-поляризованного тока

Н. Х. Усеинов

Институт физики Казанского федерального университета, Казань

В докладе излагаются результаты исследований, проведённых автором в течение последних 20 лет.

Тематика исследований охватывает круг проблем, связанных со спин-поляризованным транспортом электронов проводимости при процессах перемагничивания в магнитных гетероструктурах наноразмерного масштаба, где различные ферромагнитные слои разделены диэлектриками, полупроводниками, нормальными или тяжёлыми металлами.

Объектами исследований являются наноструктуры: точечные контакты, спиновые клапаны, магнитные туннельные контакты (барьеры), магнитные симметричные и несимметричные гетероструктуры (туннельные переходы), туннельные контакты с наночастицами, — которые в настоящее время при наличии соответствующего оборудования могут быть синтезированы.

В настоящее время исследуется влияние эффектов спин-орбитального взаимодействия (СОВ) на спин-поляризованные токи в магнитных туннельных контактах (МТК): ферромагнитный металл — барьерный слой — ферромагнитный металл. Аналитические выражения для токов выведены в приближении квазиклассических функций Грина и решения уравнений Больцмана. Получены аналитические выражения для амплитуд коэффициентов прохождения электронов проводимости через барьерный слой. Для этого записываются граничные условия для состояний рассеяния каждого спина, задаваемые уравнением Шрёдингера с учётом СОВ Рашбы и Дрессельхауза.

Как известно, обычное туннельное магнитосопротивление (ТМС) зависит от разницы между проводимостями МТК в параллельной и антипараллельной конфигурациях ферромагнитных слоёв. В данной работе показано, что в гетероструктурах «ферромагнетик — барьерный слой — ферромагнетик» из-за эффектов СОВ обычное ТМС становится анизотропным — этот эффект называют туннельным анизотропным магнитосопротивлением (ТАМС). Он описывает изменения в ТМС, когда ось, вдоль которой определяют параллельные и антипараллельные конфигурации намагниченностей, вращается относительно кристаллографической опорной оси.

В рамках предлагаемой теоретической модели, в зависимости от направлений намагниченности в ферромагнетиках, влияние СОВ Рашбы и Дрессельхауза приводит к различиям между вероятностями туннельного прохождения и отражения электронных спинов каждой ориентации на интерфейсах. Это обусловливает возникновение анизотропной локальной плотности состояний на поверхности Ферми ферромагнитных металлов. Необходимы дальнейшие исследования от квантовой спиновой динамики к макроскопической кинетике!

Воскресенье, 1 ноября · вечер · доклад вне программы

От квантового уравнения для матрицы плотности к основному уравнению спиновой химии

И. А. Фролов[1,2], П. А. Пуртов[1,2], К. М. Салихов[3]

[1] *Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*
[3] *Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань*

Основное уравнение спиновой химии обычно записывают в лиувиллевском представлении

$$\frac{\partial \rho(\vec{q},t)}{\partial t} = i\hat{\hat{L}}(\vec{q})\,\rho(\vec{q},t) + \hat{\hat{L}}(\vec{q})\,\rho(\vec{q},t) - \hat{\hat{U}}(\vec{q})\,\rho(\vec{q},t)$$

где $\hat{\hat{L}}(\vec{q}) = \hat{\hat{\Omega}} + i\hat{\hat{R}} + \hat{\hat{\Omega}}(\vec{q})$ — лиувиллиан, включающий в описание не зависящую от координат спиновую эволюцию, обусловленную изотропным СТВ и зеемановским взаимодействием с внешними магнитными полями ($\hat{\hat{\Omega}}$), процессы спиновой релаксации ($\hat{\hat{R}}$), а также зависящую от координат спиновую эволюцию, обусловленную, например, обменным взаимодействием или анизотропным СТВ ($\hat{\hat{\Omega}}(\vec{q})$). Матричные элементы динамического лиувиллиана связаны с матричными элементами соответствующего спин-гамильтониана соотношением $(\hat{\hat{L}})_{ij,\,kl} = \delta_{ik}\hat{H}_{lj} - \delta_{jl}\hat{H}_{ik}$. Оператор $\hat{\hat{U}}(\vec{q})$ описывает спин-зависимую рекомбинацию РП; матричные элементы этого оператора характеризуют скорость ухода в продукт различных компонент матрицы плотности.

Приведённые кинетические уравнения, как правило, хорошо описывают магнитно-спиновые эффекты в радикальных реакциях. Решив их, можно рассчитать эффекты химической поляризации спинов, зависимость рекомбинации радикалов от индукции внешнего магнитного поля и влияние магнитных изотопов РП на их рекомбинацию.

Однако многие свойства уравнения не всегда строго обоснованы. В ряде случаев встречаются противоречия. Сообщение посвящено некоторым обоснованиям основного уравнения спиновой химии.

Литература

1. *Salikhov K. M., Molin Yu. N., Sagdeev R. Z., Buchachenko A. L.* Spin Polarization and Magnetic Effects in Radical Reactions / Ed. Yu. N. Molin. Amsterdam: Elsevier, 1984.
2. *Purtov P. A.* // Chem. Phys. Letters. 2010. V. 496. P. 335.
3. *Sosnovsky D. V., Purtov P. A.* // Chem. Phys. Letters. 2014. V. 608. P. 136.
4. *Purtov P. A.* // Zeitschrift für Physikalische Chemie. 2017. V. 231. P. 225.

Воскресенье, 1 ноября · вечер · доклад вне программы

Новая парадигма спинового обмена и его проявлений в ЭПР-спектроскопии

К. М. Салихов

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань
kevsalikhov@mail.ru

Обменное взаимодействие двух спинов описывает гамильтониан

$$H = \omega_a \mathbf{S}_a + \omega_b \mathbf{S}_b + J(r)\mathbf{S}_a\mathbf{S}_b. \quad (1)$$

За одним названием «обменное сужение» стоят две разные физические ситуации. В жёсткой структуре расстояние r и обменный интеграл J постоянны, и частоты линий спектра равны разностям собственных значений гамильтониана: $H\Psi_n = E_n\Psi_n$, $E_n - E_m = \hbar\omega$. В разбавленном растворе всё иначе: $r(t)$, а с ним и $J(r)$, случайно меняются со временем.

Во втором случае резонансные частоты находят из кинетических уравнений для намагниченности спинов ансамбля. Для парциальных намагниченностей подансамблей спинов с частотами ω_k записаны модифицированные уравнения Блоха, учитывающие эффект отдачи от партнёра по столкновению. Уравнение для x-компоненты:

$$\frac{\partial M_{kx}}{\partial t} = -(\omega_k - \omega)M_{ky} - \frac{M_{kx}}{T_{2k}} - K_{ex}CM_{kx} + \varphi_k K_{ex} C\sum_n M_{nx}, \quad (2)$$

и такие же по строению уравнения для M_{ky} и M_{kz}; здесь $M_{ku} = N_k\langle S_{ku}\rangle$, $u = x, y, z$. Последнее слагаемое описывает перенос спиновой когерентности от партнёра.

Коэффициенты кинетических уравнений составляют матрицу $\mathbf{L}$ (лиувиллиан). Её собственные векторы, $\mathbf{L}\mathbf{X}_k = \lambda_k\mathbf{X}_k$, — коллективные моды движения парциальных намагниченностей. Вещественная и мнимая части λ_k дают резонансную частоту и ширину отдельной линии спектра. Для двухчастотной модели (двух подансамблей спинов с разными собственными резонансными частотами) в условиях быстрого обмена собственные векторы поперечной намагниченности асимптотически стремятся к векторам (коллективным модам) $\mathbf{X}_1 = (-M_{1-} + M_{2-})/\sqrt{2}$, $\mathbf{X}_2 = (M_{1-} + M_{2-})/\sqrt{2}$. Движение каждой моды описывается уравнением гармонического осциллятора с затуханием. Элементарное возбуждение одиночным фотоном создаёт квазичастицу соответствующей коллективной моды. Эти квазичастицы — бозоны и, в принципе, могут образовывать бозе-эйнштейновский конденсат. В присутствии СВЧ-поля формируются квазичастицы, которые можно назвать спиновыми поляритонами.

Основные положения новой парадигмы спинового обмена [1–3]:

1. спиновый обмен не всегда эквивалентный;
2. диполь-дипольное взаимодействие даёт в скорость переноса спиновой когерентности от партнёра вклад, который вычитается из вклада спинового обмена;
3. при медленном переносе спиновой когерентности спиновый обмен и диполь-дипольное взаимодействие, складываясь, уширяют линии ЭПР; каждая резонансная линия имеет при этом смешанную форму: сумма лоренцевых линий поглощения и дисперсии;
4. перенос спиновой когерентности (эффект «отдачи») создаёт коллективные моды движения намагниченности спинов; отсюда новая интерпретация обменного сужения спектра ЭПР при быстрой передаче когерентности;
5. при увеличении скорости спинового обмена эффект обменного сужения спектра ЭПР возникает не обязательно.

Предложено новое кинетическое уравнение движения намагниченности спинов в разбавленных парамагнетиках. Оно учитывает перенос спиновой когерентности, вызванный спиновым обменом и диполь-дипольным взаимодействием спинов. На модели с тремя частотами показано, как с ростом скорости переноса когерентности меняются частоты, ширины и интегральные интенсивности линий.

Литература

1. *Салихов К. М.* // УФН. 2019. Т. 189. С. 1017–1043.

2. *Salikhov K. M.* Fundamentals of Spin Exchange. Story of a Paradigm Shift. Cham: Springer, 2019.
3. *Salikhov K. M.* // Appl. Magn. Reson. 2020. V. 51. P. 297–325.

Понедельник, 2 ноября · 15:45 · устный доклад

Квантовая запутанность в двухспиновой системе (s = 1/2) с диполь-дипольным взаимодействием и химическим обменом

Г. А. Бочкин, Э. Б. Фельдман

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

Квантовая запутанность изучена в системе из двух спинов (s = 1/2), связанных диполь-дипольным взаимодействием (ДДВ), с химическим обменом с помощью уравнения Линдблада. Рассмотрена простейшая модель химического обмена, когда два спина, связанных ДДВ, обмениваются друг с другом между двумя положениями на одной прямой в плоскости, перпендикулярной сильному внешнему магнитному полю. Существенно, что при этом ДДВ не меняется, и оно же является источником квантовой запутанности в системе после воздействия резонансного радиочастотного импульса. Определена критическая температура, при которой в системе возникает запутанность (до 27 мК при ларморовской частоте 500 МГц для протонов). Изучена зависимость критической температуры от скорости обменного процесса. Показано, что при медленном обмене запутанность уменьшается с увеличением скорости обменного процесса, а при быстром обмене увеличивается.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 124013000760-0).

Понедельник, 2 ноября · 16:05 · устный доклад

Коллективные моды квантово-разупорядоченных магнетиков

А. И. Смирнов

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва

В этом сообщении мы рассмотрим один из примеров неупорядоченных спиновых систем с особым видом коллективных спиновых возбуждений. Мы обсудим квантово-разупорядоченные спиновые системы в диэлектрических кристаллах, содержащих магнитные ионы, локализованные периодическим образом на кристаллической решётке. В случае, когда такая спиновая система связана сетью антиферромагнитных обменных связей с низкой размерностью или сильно фрустрированной структурой, в основном состоянии дальний магнитный порядок может отсутствовать. Здесь мы имеем в виду магнитный порядок в традиционном смысле, то есть порядок ферро- или антиферромагнитного типа. В рассматриваемых нами системах отсутствие обычного магнитного порядка при абсолютном нуле температуры связано с присущими низкоразмерным или фрустрированным системам сильными нулевыми колебаниями, разрушающими этот порядок.

Одной из наиболее полно изученных систем такого рода является антиферромагнитная гейзенберговская цепочка спинов $S = 1/2$. Модель такой цепочки хорошо реализуется в ряде антиферромагнитных диэлектриков, которые являются трёхмерными кристаллами, но обменное взаимодействие вдоль одного из направлений оказывается значительно сильнее, чем в других направлениях. Волновая функция основного состояния этой цепочки была построена точно, и теория предсказала, что среднее значение проекции спина в любом узле решётки равно нулю, однако антиферромагнитные корреляции спинов спадают медленно (степенны́м образом) [1]. При этом элементарные возбуждения (квазичастицы) имеют структуру вида доменной стенки, то есть сильно отличаются от структуры магнона в обычном антиферромагнетике [2]. Эти элементарные возбуждения, в отличие от магнонов, несут спин $S = 1/2$ и являются фермионами, что приводит к особому виду спектра рассеяния нейтронов и поглощения электромагнитных волн [3,4]. Мы рассмотрим эксперименты, подтверждающие существование этих фермионов [6], их распространение на значительные расстояния [5], а также образование особого вида ферми-жидкости из этих квазичастиц [7]. Описанные теоретические и экспериментальные результаты создают весьма необычную картину спиновой динамики концентрированной и сильно взаимодействующей системы спинов при низких температурах и вблизи абсолютного нуля.

Литература

1. *Bethe H.* // Z. Phys. 1931. V. 71. P. 205.
2. *Faddeev L. D., Takhtajan L. A.* // Phys. Lett. A. 1981. V. 85. P. 375.
3. *Tennant D. A. et al.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 13368.
4. *Lake B. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 111. 137205.
5. *Sologubenko A. V. et al.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. 054412.
6. *Dender D. C. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. P. 1750.
7. *Povarov K. Yu., Soldatov T. A., Wang R.-B., Zheludev A., Smirnov A. I., Starykh O. A.* // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 128. 187202.

Понедельник, 2 ноября · 16:25 · устный доклад

Уравнения корреляционной магнитодинамики

А. В. Иванов[1], А. В. Лукьянов[2]

[1] *Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва*
[2] *Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва*
aiv.racs@gmail.com

Одним из примеров диссипативной системы, допускающей переход от описания на атомистическом уровне к описанию на уровне сплошной среды, являются магнетики.

В качестве исходной модели классического магнетика Гейзенберга берётся модель атомистической спиновой динамики (ASD) [1]. При этом магнитный момент каждого атома описывается вектором единичной длины с произвольной ориентацией. Атомы расположены в узлах кристаллической решётки и связаны сильным локальным обменным взаимодействием. Эволюция каждого магнитного момента описывается уравнением Ландау–Лифшица с феноменологическим диссипативным членом и ланжевеновским источником, что позволяет учитывать спин-решёточное взаимодействие и влияние температуры. ASD-модель обеспечивает релаксацию к равновесному распределению Гиббса с заданной температурой и позволяет описывать сильно неравновесные процессы в магнетиках. Современные компьютеры позволяют моделировать системы из $10^{6–9}$ атомов.

От ASD-модели можно строго перейти к N-частичному уравнению Фоккера–Планка. Переход к уравнению Фоккера–Планка, а не к уравнению Лиувилля, связан с тем, что исходная система уже является диссипативной. Затем, при помощи цепочки Боголюбова и приближения среднего поля, возможен переход к уравнению Ландау–Лифшица–Блоха (LLB), описывающему эволюцию намагниченности на уровне сплошной среды с учётом температуры [2,3].

Между тем приближение среднего поля плохо подходит для описания магнетиков с сильным локальным обменным взаимодействием, приводящим к возникновению сильных корреляций между ближайшими магнитными моментами. В работе построена новая аппроксимация двухчастичной функции распределения, учитывающая парные корреляции. Аналогичным образом могут быть введены и старшие функции распределения. Возможно, что такая аппроксимация может быть полезна при описании других физических систем.

На уровне сплошной среды такой подход приводит к модификации уравнения LLB и введению ещё одного уравнения на парные корреляции (обменную энергию), что даёт в итоге систему уравнений корреляционной магнитодинамики (CMD) [4]. В отличие от LLB, CMD оперирует параметрами дальнего (намагниченность) и ближнего (обменная энергия) порядков и значительно лучше согласуется с расчётами в рамках исходной ASD-модели, особенно при описании неравновесных процессов; позволяет получить компактное выражение для энтропии классического магнетика Гейзенберга.

Литература

1. *Eriksson O., Bergman A., Bergqvist L., Hellsvik J.* Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications. Oxford University Press, 2017.
2. *Garanin D. A.* Fokker–Planck and Landau–Lifshitz–Bloch equations for classical ferromagnets // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 3050. https://arxiv.org/abs/cond-mat/9805054v2
3. *Atxitia U., Hinzke D., Nowak U.* Fundamentals and applications of the Landau–Lifshitz–Bloch equation // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50, № 3. 033003. https://doi.org/10.1088/1361-6463/50/3/033003
4. *Иванов А. В., Зипунова Е. В., Хилков С. А.* Уравнения корреляционной магнитодинамики для ферромагнетиков // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 115, № 3. С. 176–183. https://doi.org/10.31857/S1234567822030077

Понедельник, 2 ноября · 17:00 · устный доклад

Возможности магнитного резонанса в исследовании синтетических и биологических мембран

В. И. Волков[1,2]

[1] *Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*

[2] *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

vitwolf@mail.ru

Рассматриваются ионный и молекулярный транспорт в ионообменных мембранах и полимерных электролитах для литиевых источников тока, пористых плёнках и основные закономерности обмена молекул воды и биологически активных веществ (водорастворимых производных фуллеренов) в эритроцитах, клетках дрожжей и хлореллы.

Методы исследования: ЯМР-спектроскопия высокого разрешения (в том числе вращение под магическим углом); ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля; ЯМР-релаксация. Измерения проводились на ядрах ^{1}H, ^{2}H, ^{7}Li, ^{13}C, ^{19}F, ^{17}O, ^{23}Na, ^{31}P, ^{35}Cl, ^{133}Cs.

Установлен механизм ионного и молекулярного транспорта в пространственных масштабах от десятых долей нм до мм. Это позволило выявить природу селективности основных типов катионообменных мембран к ионам щелочного ряда.

Разработана методология исследования многокомпонентных полиэлектролитов для литиевых источников тока. Рассчитаны структуры сольватных комплексов, выявлены элементарные процессы переноса катионов и анионов, предложены оптимальные составы полимерных электролитов.

Принципиально новые результаты были получены в биологических клетках: измерены проницаемости молекул воды в клетках дрожжей, хлореллы и эритроцитов. Получены значения коэффициентов латеральной диффузии. Впервые изучена проницаемость водорастворимых производных фуллеренов как пример биологически активных веществ в эритроциты.

Измерения выполнены с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН и Центра коллективного пользования НЦЧ ИФТТ РАН, г. Черноголовка. Работа выполнена по теме Государственного задания. Номер государственной регистрации 124013000743-3 (FFSG-2024-0008).

Понедельник, 2 ноября · 17:20 · устный доклад

Первый импульсный лазер на NV^-,C:HPHT-алмазе без внешнего резонатора

В. Ф. Лебедев[1], С. Ф. Уманская[2], А. Э. Саларидзе[2], Т. С. Мисникова[1], Н. В. Чернега[2], А. Д. Кудрявцева[2]

[1] *Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия*

[2] *Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

В работе [1] в секторе роста {111} многосекторной пластины HPHT-алмаза было впервые обнаружено одновременное существование двух видов вынужденного излучения (ВИ): хорошо известного широкополосного и нового — узкополосного. В секторе роста {311} при приблизительно одинаковой с сектором {111} концентрации NV^--центров не возникают ни новое узкополосное ВИ, ни лазерная генерация. Анализ расчётных значений концентраций C, C^+ и NV^--центров в секторах роста {111} и {311} показал, что возникновение узкополосного ВИ может быть объяснено тем, что в секторе {111} концентрация C-центров существенно превышала концентрацию NV^--центров. Обнаружено также, что спектр узкополосного ВИ может иметь при комнатной температуре модовую структуру, которая ранее не наблюдалась. Узкополосное ВИ, в отличие от широкополосного, возбуждается только при импульсной оптической накачке. В работе [1] была предложена также модель возникновения узкополосного ВИ в системе NV^-–C-центров. Таким образом, установлено, что для эффективного возбуждения узкополосного ВИ необходимо выбирать в алмазе сектор роста {111} с высокой концентрацией C- и NV^--центров. Тогда в публикации [2], в которой описана первая лазерная генерация с внешним резонатором на HPHT-алмазе с NV^--центрами, лазерная генерация получена в результате усиления именно узкополосного ВИ в секторе {111}.

Важно отметить, что была предпринята и попытка получения лазерной генерации на широкополосном ВИ при непрерывной накачке [3]. При одновременном применении непрерывной лазерной накачки и внутрирезонаторного излучения непрерывного полупроводникового лазера с длинами волн соответственно λ = 532 и 687 нм в эксперименте регистрировались пороговый режим и незначительное сужение спектра излучения в полосе с максимумом вблизи 690 нм. Авторами этой работы данное наблюдение было интерпретировано как непрерывная лазерная генерация на NV^--центрах. В настоящей работе впервые предложен импульсный NV^-,C:HPHT-алмазный лазер без внешнего резонатора с оптической импульсной накачкой на длине волны λ = 532 нм. Максимум в спектре генерации находился вблизи λ = 714 нм при ширине полосы FWHM ≈ 6 нм. Энергия импульсов лазерной генерации была одинаковой для пучков излучения, выходивших из противоположных торцов алмазной пластины, при объёме активной среды в секторе роста {111} ≈ 0,25×0,5×5 мм^3. Максимальная энергия импульса генерации составила 6,2 мкДж при оптическом КПД 0,33 %. Излучение имело линейную поляризацию, субнаносекундную длительность и расходимость на уровне ≈ 13–15 мрад. Обнаружено, что в условиях комбинированной накачки, когда к основной накачке с λ = 532 нм добавлялось непрерывное лазерное излучение с λ = 403 нм, происходит увеличение энергии импульса генерации в ≈ 1,5 раза. В этом случае наблюдается также и слабое падение, примерно на 35 %, энергии импульсов лазерной генерации с ростом частоты импульсов накачки от 1 до 10 Гц (при основной накачке это падение оказалось пятикратным).

Литература

1. *Lebedev V. F., Vasilev E. A., Klepikov I. V. et al.* Two types of stimulated emission in HPHT diamond with a high concentration of NV centers // Diamond and Related Materials. 2024. 111763.
2. *Savvin A., Dormidonov A., Smetanina E. et al.* NV^- diamond laser // Nature Communications. 2021. V. 12. 7118.
3. *Lindner L., Hahl F., Luo T. et al.* Continuous-wave nitrogen-vacancy diamond laser system assisted by a red diode laser // arXiv:2306.13973v1. 2023.

Вторник, 3 ноября · 10:05 · юбилейное заседание

Квантовая динамика вихрей в сверхпроводниках

Р. Кинзибаев[1], О. Астафьев[1,2], А. С. Мельников[1,3]

[1] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Московская область, Россия*
[2] *Сколковский институт науки и технологий, Россия*
[3] *Институт физики микроструктур РАН, 603950 Нижний Новгород, ГСП-105, Россия*

В докладе планируется обсудить общие подходы к квантованию динамики вихрей в сверхпроводящих системах и возможности экспериментального наблюдения таких квантовых эффектов в мезоскопических сверхпроводниках. Для случая вихрей в узких сверхпроводящих мостиках задача о туннелировании вихрей в присутствии транспортного тока сведена к эффективной двухуровневой модели, в рамках которой исследован процесс когерентного квантового проскальзывания фазы. Предложено теоретическое объяснение дуального эффекта Шапиро, наблюдаемого ранее в сверхпроводящих мостиках.

Работа поддержана проектом РНФ № 25-12-00042.

Вторник, 3 ноября · 10:30 · юбилейное заседание

Флуктуации и когерентные вихри в двумерной турбулентности

И. В. Колоколов

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

Доклад посвящён современным представлениям о турбулентности в эффективно двумерных системах, к которым относятся тонкие слои жидкости и атмосфера Земли. Если система ограничена в размерах, то в некотором диапазоне параметров турбулентные флуктуации порождают когерентное вихревое течение. Иными словами, энергия передаётся от хаотических потоков к регулярным. Оказывается, что структуру возникших вихрей в значительной степени можно описать аналитически. Кроме того, сама возможность возникновения вихрей зависит от соотношения между относительно малыми диссипативными константами.

Вторник, 3 ноября · 11:15 · юбилейное заседание

От единичного квантового излучателя к функциональной архитектуре в инженерии нанообъектов: методы сверхвысокого разрешения, прецизионного синтеза и нанолитографии

А. В. Наумов

Троицкое обособленное подразделение ФИАН им. П. Н. Лебедева; Московский педагогический государственный университет; Институт спектроскопии РАН
www.single-molecule.ru

В докладе представлены достижения и перспективы фотоники одиночных молекул и, в целом, квантовых излучателей различной природы (органических молекул, молекулярных комплексов, полупроводниковых коллоидных квантовых точек, центров окраски в алмазе). Обсуждаются методы флуоресцентной спектроскопии и наноскопии (оптической дальнеполевой микроскопии сверхвысокого пространственного разрешения) в широком диапазоне температур, их разнообразные междисциплинарные приложения в области диагностики и сенсорики, перспективы развития этого направления, в том числе в области биомедицины, квантовой оптики, сенсорики, материаловедения. Рассматриваются также методы комбинированного исследования, совмещающие люминесцентную спектромикроскопию с техникой атомно-силовой микроскопии, электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). В докладе подчёркивается, что дальнейший прогресс в этом направлении во многом определяется внедрением инновационных гибридных методов синтеза (инжиниринга) наноструктур. Среди ключевых подходов — сочетание технологии ДНК-оригами с электронно-лучевой нанолитографией, что обеспечивает точное позиционирование одиночных излучателей, контроль их фотофизических свойств и создание активных подложек для гигантского усиленного КРС. Интеграция передовых методов синтеза с высокочувствительной спектроскопией одиночных квантовых объектов закладывает основу технологий сенсорики и микроскопии нового поколения.

Литература

1. *Наумов А. В.* Низкотемпературная спектроскопия одиночных молекул в твёрдых матрицах… // УФН. 2013. Т. 56. С. 605.
2. *Naumov A. V. et al.* Far-Field Nanodiagnostics of Solids with Visible Light… // Angew. Chem. 2009. V. 48. P. 9747.
3. *Naumov A. V. et al.* Micro-Refractometry and Local-Field Mapping… // Nano Lett. 2018. V. 18. P. 6129.
4. *Аржанов А. И. и др.* Фотоника полупроводниковых квантовых точек // Фотоника (Photonics Russia). 2021. Т. 15. С. 622; 2022. Т. 16. С. 96.
5. *Ремпель А. А. и др.* Квантовые точки… // Успехи химии. 2024. Т. 93. RCR5114.
6. *Podshivaylov E. A. et al.* A quantitative model of multi-scale single QD blinking // J. Mater. Chem. C. 2023. V. 11. P. 8570.
7. *Neliubov A. Y. et al.* Enigmatic color centers in microdiamonds… // Phys. Rev. B. 2023. V. 107. L081406.
8. *Kozhina E. P. et al.* Ultrasensitive Optical Fingerprinting of Biorelevant Molecules… // Biosensors. 2022. V. 13. P. 46.
9. *Аржанов А. И. и др.* Штамповая электронная нанолитография… // Фотоника (Photonics Russia). 2025. Т. 19. С. 292.
10. *Arzhanov A. I. et al.* DNA-Origami Apertured Tiles… // Colloid Journal. 2025. V. 87. P. 790.

Вторник, 3 ноября · 11:40 · юбилейное заседание (онлайн)

«Стрела времени» в метастабильной Вселенной

В. В. Бражкин

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия
brazhkin@hppi.troitsk.ru

Обсуждается связь наличия во Вселенной метастабильных объектов с различным «временем жизни» с ростом энтропии и «стрелой времени». Конечное «время жизни» метастабильных объектов позволяет приписать многим из них существование собственных «локальных часов». Распад любой метастабильной системы во Вселенной приводит к образованию более стабильных объектов и к испусканию фотонов и других частиц. Эти фотоны и частицы взаимодействуют с частицами более стабильных подсистем во Вселенной, что приводит к их эргодичности. Испускание фотонов в расширяющейся Вселенной при распаде метастабильных состояний делает эти процессы необратимыми и задаёт «стрелу времени», несмотря на обратимость физических уравнений, описывающих данные процессы.

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 24-12-00037.

Казань, 30 октября – 3 ноября 2026

Квантовая когерентность состояний Белла

Н. К. Соловаров

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, Казань

Квантовая когерентность и запутанность считаются двумя, очевидно, связанными характеристиками, отличающими составные (многочастичные) квантовые системы от классических. Однако последовательная теория их взаимосвязи отсутствует [1].

Для отдельного материального кубита наличие квантовой когерентности отождествляется с нахождением кубита в суперпозиционном состоянии перехода между стационарными дискретными энергетическими уровнями с излучением (или поглощением) кванта поля. Мерой одночастичной квантовой когерентности служит абсолютная величина недиагонального матричного элемента матрицы плотности кубита. Многочастичная квантовая когерентность ансамбля кубитов отождествляется с пространственной и временной упорядоченностью фаз их волновых функций.

Сложность установления взаимосвязи между квантовой когерентностью и запутанностью состоит в отсутствии квантовой когерентности в существующих многочисленных определениях мер запутанности. Модельными в определении мер запутанности в квантовой теории служат считающиеся максимально запутанными и неразделимыми двухкубитные пары Белла [2].

В [3] предложен алгоритм разложения и получены математически точные разложения матриц плотности пар Белла в виде сумм четырёх равновероятных пар матриц плотности квантово-коррелированных кубитов. Существование таких разложений демонстрирует справедливость предположения Эйнштейна–Подольского–Розена о возможности статистического описания чистых состояний составных квантовых систем в модели скрытых параметров. Скрытыми параметрами оказались относительные фазы волновых функций разделённых кубитов. Принципиальное отличие коррелированных пар матриц плотности разделённых кубитов состоит в наличии собственной квантовой когерентности (недиагональных ненулевых матричных элементов) в стационарных собственных состояниях кубитов.

Можно сделать вывод, что механизм формирования запутанности многочастичных квантовых систем обусловлен установлением определённых фазовых соотношений их собственных одночастичных квантовых когерентностей.

Литература

1. *Streltsov A., Adesso G., Plenio M. B.* Colloquium: Quantum coherence as a resource // Rev. Mod. Phys. 2017. V. 89. 041003.
2. *Horodecki R., Horodecki P., Horodecki M., Horodecki K.* Quantum entanglement // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 865.
3. *Соловаров Н. К.* Сепарабельность, скрытые параметры и квантовая коррелированность пар ЭПР (Эйнштейна–Подольского–Розена)–Бома–Белла // ЖЭТФ. 2025. Т. 168. С. 772 (JETP. 2025. V. 168. P. 784).

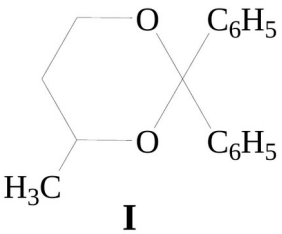
Казань, 30 октября – 3 ноября 2026

2,2-Дифенил-4-метил- и 5-метил-1,3-диоксаны: геометрия, топологические параметры, упаковка в кристаллах и стереоэлектронные эффекты

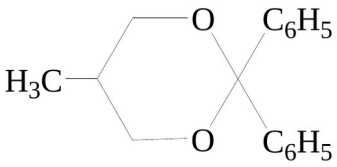
Е. С. Мещерякова[1], Т. В. Тюмкина[1], В. В. Кузнецов[2], Л. М. Халилов[1]

[1] *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа*
[2] *Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа*
khalilovlm@gmail.com

С помощью методов РСА, а также NBO, QTAIM и анализа по Хиршфельду исследованы особенности структуры и стереоэлектронные эффекты в молекулах 2,2-дифенил-4-метил- и 5-метил-1,3-диоксанов (соединения **I** и **II** соответственно).



I



II

Установлено, что молекулярная структура обоих соединений отвечает конформации *кресла* с экваториальной ориентацией метильного заместителя. Молекулы соединений **I** и **II** образуют центросимметричные моноклинные кристаллы (пространственная группа $P2_1/n$) с одной молекулой в независимой части элементарной ячейки ($Z = 4$, $Z' = 1$). При этом в кристаллах **I** молекулы образуют 2D-мотив («кирпичная кладка») за счёт водородных связей C–H…π, тогда как молекулы соединения **II** формируют цепи (1D-мотив) за счёт водородных связей C–H…O. Таким образом, положение метильной группы определяет стерическую доступность атомов для образования межмолекулярных связей, что приводит к существенным различиям в кристаллической упаковке.

Данные QTAIM свидетельствуют о влиянии фенильных заместителей на топологические параметры ацетальных связей и парциальный заряд атома C^2 кольца за счёт взаимодействия неподелённой электронной пары кислорода с антисвязывающей *σ-орбиталью связи C^{2}–C_{6}H_{5}, а также с антисвязывающими σ*-орбиталями связей C–O. Согласно результатам NBO-анализа σ-орбиталь C–O — хороший донор и плохой акцептор по сравнению с σ-орбиталями C–C и C–H, а σ-орбиталь C–C — лучший акцептор по сравнению с σ-орбиталью C–H. Вместе с тем вклад орбиталь-орбитальных взаимодействий минимален и не оказывает существенного влияния на длины связей в 1,3-диоксановом цикле. Расчёт в приближении B3LYP/6-31G(d,p) выявил относительно слабое влияние стереоэлектронного и упаковочного эффектов на длины связей и их топологические параметры.

Установлено также, что на поверхности Хиршфельда структуры **I** более выражены контакты C–H…π, тогда как поверхность Хиршфельда структуры **II** характеризуется отсутствием областей, указывающих на наличие коротких контактов. При этом контакты O…H преобладают в структуре **II**, тогда как для соединения **I** наблюдаются взаимодействия H…C/C…H.

Работа выполнена в рамках госзадания FMRS-2025-0033.

Постановки задач для мастерских

пятница, 30 октября

Пятница, 30 октября · 13:30 · постановка задачи · мастерская № 1

Существует ли интерференция каналов выброса электронов из молекулярных отрицательных ионов?

Н. Л. Асфандиаров, М. В. Муфтахов, С. А. Пшеничнюк

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа
nail_asf@mail.ru

Система. Производные ферроцена с электрон-акцепторными заместителями в газовой фазе; масс-спектрометр отрицательных ионов, камера ионизации при 340–400 K, однократные столкновения в высоком вакууме, энергия падающих электронов 0–15 эВ (резонансный захват — при 0–1 эВ). Молекула захватывает электрон за $\sim 10^{-15}$ с; за 100–500 фс избыточная энергия перераспределяется по колебательным степеням свободы аниона; выброс электрона происходит, когда анион возвращается к геометрии нейтральной молекулы. По теории поля лигандов анион ферроцена описывается ионной моделью с зарядом железа, близким к +1; расчёты ДФТ дают для исследованных соединений заряды лигандов от −0,28 до −0,44 и заряд атома железа от +0,61 до +0,95.

Наблюдаемые величины. Время жизни молекулярных анионов τ_a относительно автоотщепления электрона; в эксперименте оно лежит в диапазоне 40–1500 мкс. Измеренное τ_a связывается со сродством к электрону EA аррениусовской оценкой

$$\tau_a = \tau_0 \exp\left(\frac{N \cdot EA}{EA + Nk_BT + \varepsilon}\right) \qquad (1)$$

где N — число внутренних степеней свободы иона, T — температура источника ионов, ε — энергия электрона, $\tau_0 \approx 10^{-13}$–10^{-12} с — параметр порядка периода колебаний ядер. По (1) сродство к электрону восстанавливается с ошибкой 5–10 %.

Характерные времена. Захват электрона $\sim 10^{-15}$ с; размешивание энергии по колебательным степеням свободы 10^{-13}–10^{-12} с; выброс электрона (возврат к исходной геометрии) $\sim 10^{-5}$ с; сам акт выброса, по оценке, снова $\sim 10^{-15}$ с.

Что не сходится. В ряду из 20 производных ферроцена [1] 18 образуют долгоживущие анионы, но интерференцию каналов выброса доказать не удалось, а данные 1993 г. нельзя использовать: температура съёмки спектров не фиксировалась. Новые измерения для семи соединений (совместно с ИНЭОС РАН) показали, что несимметрично замещённые производные укладываются в корреляцию (1), а два симметрично замещённых комплекса из неё выпадают; в них однократно занятая орбиталь делокализована по лигандам с зарядами −1, а заряд железа практически равен +1. Вопросы к мастерской: корректна ли для таких анионов ионная модель; нужно ли учитывать интерференцию каналов выброса; как в кинетике на микросекундной шкале учитывать акт выброса длительностью $\sim 10^{-15}$ с и верна ли оценка τ_0. Теория Христофору [5] даёт зависимость τ_a от энергии резче наблюдаемой, а подбор её параметров критичен.

Работа поддержана РНФ, грант № 25-62-00004. Исследованные соединения предоставлены А. Родионовым (ИНЭОС РАН).

Литература

1. *Khvostenko V. I., Asfandiarov N. L., Lukin V. G.* Lifetimes of molecular negative ions of ferrocene derivatives // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 1993. V. 63. P. 431–438.
2. *Хвостенко В. И.* Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии. М.: Наука, 1981. 169 с.
3. *Asfandiarov N. L., Pshenichnyuk S. A., Vorob'ev A. S., Nafikova E. P., Modelli A.* // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2015. V. 29. P. 910–912.
4. *Пшеничнюк С. А., Асфандиаров Н. Л., Воробьев А. С., Матейчик Ш.* // УФН. 2022. Т. 192. С. 177.
5. *Christophorou L. G., Hadjiantoniou A., Carter J. G.* // J. Chem. Soc. Faraday Trans. II. 1973. V. 69. P. 1713–1722.

Пятница, 30 октября · 14:30 · постановка задачи · мастерская № 3

Формулировка и решение системы скоростных уравнений в системе NV^-–C-центров в HPHT-алмазе: создание инверсии населённостей и лазерная генерация

В. Ф. Лебедев

Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения
lebedevvf@mail.ru

Система. Синтетический HPHT-алмаз, сектор роста {111}, с высокой концентрацией NV^--центров (от 10 ppm) и большой концентрацией C-центров (одиночный азот); концентрации C, C^+ и NV^- рассчитаны по полосам поглощения 1344 $см^{-1}$, 1332 $см^{-1}$ и 570 нм. Образцы — пластины 5×5×0,6 $мм^3$ и лазерные элементы ≈ 1×(0,5–1)×5 $мм^3$. Основная накачка — импульсы наносекундной и более короткой длительности на λ = 532 нм в широкую полосу поглощения NV^--центров с максимумом при λ = 570 нм; частота следования 1–10 Гц; опыт при комнатной температуре. Начальное состояние — равновесие с окружающей средой, воспроизводимо.

Наблюдаемые величины. Одновременно регистрируются спектр, энергия и длительность импульсов вынужденного излучения (ВИ) и лазерной генерации, а также поляризация и расходимость излучения; временное разрешение — наносекунды и короче. Установлено: добавление к импульсной накачке непрерывного излучения, то есть при комбинированной накачке, ∼30 мВт на длине волны λ = 403–405 нм заметно увеличивает энергию импульса генерации; с ростом частоты повторения импульсов накачки энергия импульса генерации резко падает, при комбинированной накачке — заметно слабее; энергия генерации зависит от объёма области инверсии (изменяется, например, применением цилиндрических линз с различным фокусным расстоянием при неизменной энергии накачки).

Характерные времена. Время жизни люминесценции NV^--центров ∼10 нс; есть опубликованные оценки вероятностей переноса энергии возбуждения в системе NV^-/NV^0/C-центров; разделение масштабов времени ещё предстоит установить. Возможный медленный процесс — перенос электрона с C на NV^0 [1].

Что не сходится. В образцах присутствует не один, как считалось [2], а два типа ВИ — широкополосное и узкополосное [3]. Первая лазерная генерация с внешним резонатором (2021 г., оптический КПД ≈ $6\cdot10^{-3}$ % [2]) получена на усилении именно узкополосного ВИ. При недостаточной концентрации C-центров узкополосное ВИ не возбуждается, поэтому есть основания считать активной средой систему NV^-–C-центров [3]. Не вполне ясны природа излучения в этой системе и динамика передачи энергии возбуждения между центрами; моделирования нет. Задача мастерской — предложить схему возникновения узкополосного ВИ в системе NV^-, NV^0, C и C^+-центров, сформулировать и решить систему скоростных уравнений в системе центров при импульсной и комбинированной накачках, чтобы описать создание инверсии населённостей и наблюдаемые импульсы излучения, зависимости энергии генерации от объёма инверсии населённостей, энергии и частоты повторения импульсов накачки.

Литература

1. *Alkauskas A., Van de Walle C. G., Razinkovas L., Ulbricht R.* Charge state equilibration of nitrogen-vacancy center ensembles in diamond: the role of electron tunneling // Phys. Rev. Lett. 2026. V. 137. 136401.
2. *Savvin A., Dormidonov A., Smetanina E. et al.* NV^- diamond laser // Nat. Commun. 2021. V. 12. 7118.
3. *Lebedev V. F., Vasilev E. A., Klepikov I. V. et al.* Two types of stimulated emission in HPHT diamond with a high concentration of NV centers // Diamond Relat. Mater. 2024. V. 150. 111763.
4. *Jeske J., Lau D., Vidal X. et al.* Stimulated emission from nitrogen-vacancy centres in diamond // Nat. Commun. 2017. V. 8. 14000.
5. *Лебедев В. Ф., Мисникова Т. С., Рывкина Я. А. и др.* Спектрально-временные характеристики узкополосной суперлюминесценции в NV^-,C:HPHT-алмазе // Квантовая электроника. 2025. Т. 55, № 11. С. 759.

Пятница, 30 октября · 16:00 · постановка задачи · вечерний дискуссионный клуб

Квантовое измерение как немарковский процесс: поиск кинетического уравнения с памятью об истории коллапсов

Р. В. Ли

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
roman.lithium@gmail.com

Система. Ансамбль идентичных независимых квантовых систем, состояние которых задаётся матрицей плотности (например, частицы со спином 1/2), и макроскопические измерительные приборы в смысле фон Неймана, описываемые классическими переменными: взаимодействие с прибором приводит к однократному коллапсу в фиксированном базисе с регистрацией результата (например, измеритель вертикальной проекции спина). Взаимодействие прибора с системой характеризуется интенсивностью, нормированной на единицу по времени, с длительностью T; за это время должно произойти ровно одно измерение с одним коллапсом. Кроме взаимодействия с прибором системы полностью изолированы. Начальное состояние ансамбля воспроизводимо в точности; перед измерением приборы приводятся в состояние готовности.

Наблюдаемые величины. Показания приборов (вертикальная проекция спина) и средние по ансамблю значения произвольных наблюдаемых в конечном состоянии (например, горизонтальная проекция спина). Предположительно, последние отличаются от предсказаний известных моделей в критических ситуациях и совпадают с ними во всех остальных; окно наблюдения — от пикосекунд до наносекунд.

Характерные времена. Время коллапса τ_{coll} традиционно считается нулевым; время собственной эволюции τ_{sys} — от аттосекунд (электрон) до пикосекунд (спиновая и ядерная динамика), особый интерес представляют стационарные состояния; время взаимодействия с прибором T неизвестно («гейзенберговский разрез», в разных построениях от пикосекунд до микросекунд); время памяти прибора τ_{mem}, по истечении которого он вновь готов к измерению. Предполагаемая иерархия: $\tau_{\mathrm{coll}} \ll \tau_{\mathrm{sys}} \ll T \ll \tau_{\mathrm{mem}}$.

Что не сходится. Пусть $M(t)$ — внутренняя степень свободы прибора: 1, пока измерение не состоялось, 0 — после. Поскольку прибор совершает ровно одно измерение за время взаимодействия, уравнение на матрицу плотности системы должно быть условным относительно $M(t)$, иначе появятся многократные или отсутствующие коллапсы; это и есть память прибора о факте измерения и его исходе. Уравнения типа Линдблада [1, 2] такой памяти не содержат и для боровских приборов не годятся. Теории спонтанной локализации GRW [3] и CSL [4] вводят коллапсы в случайные моменты и не объясняют существования приборов ровно с одним коллапсом за время T; теория с событиями EEQT [5] содержит память о событиях, но страдает тем же. Отсюда требование: искомое уравнение должно иметь по меньшей мере интегральную форму. Вопросы группе: как построить описание системы при взаимодействии с прибором, если известно, что коллапс за время T произойдёт ровно один раз; является ли момент коллапса случайной величиной, распределённой вдоль интервала взаимодействия; как изменится результат, когда интервалы измерений двух приборов пересекутся — ожидается, что статистика конечных состояний разойдётся с линдбладовским предсказанием.

Литература

1. *Breuer H.-P., Petruccione F.* The Theory of Open Quantum Systems. Oxford University Press, 2002.
2. *van Kampen N. G.* Stochastic Processes in Physics and Chemistry. 3rd ed. Amsterdam: North-Holland, 2007.
3. *Ghirardi G. C., Rimini A., Weber T.* Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems // Phys. Rev. D. 1986. V. 34. P. 470–491.
4. *Pearle P.* Combining stochastic dynamical state-vector reduction with spontaneous localization // Phys. Rev. A. 1989. V. 39. P. 2277–2289.
5. *Blanchard Ph., Jadczyk A.* Event-enhanced quantum theory and piecewise deterministic dynamics // Ann. Phys. 1995. V. 507, № 6. P. 583–599.
6. *Zwanzig R.* Ensemble method in the theory of irreversibility // J. Chem. Phys. 1960. V. 33, № 5. P. 1338–1341.
7. *Nakajima S.* On quantum theory of transport phenomena: steady diffusion // Prog. Theor. Phys. 1958. V. 20, № 6. P. 948–959.

Результаты мастерских

понедельник, 2 ноября

Понедельник, 2 ноября · 09:30 · результаты мастерской № 1

Существует ли интерференция каналов выброса электронов из молекулярных отрицательных ионов?

Н. Л. Асфандиаров[1], М. В. Муфтахов[1], С. А. Пшеничнюк[1], А. В. Иванов[2], А. И. Иванов[3]

[1] *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа*
[2] *Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва*
[3] *Волгоградский государственный университет, Волгоград*
nail_asf@mail.ru

Наблюдаемые величины. Время жизни молекулярных анионов τ_a относительно автоотщепления электрона; в эксперименте оно лежит в диапазоне 40–1500 мкс. Измеренное τ_a связывается со сродством к электрону EA аррениусовской оценкой [2, 3]

$$\tau_a = \tau_0 \exp\left(\frac{N \cdot EA}{EA + Nk_BT + \varepsilon}\right) \qquad (1)$$

где N — число внутренних степеней свободы иона, T — температура источника ионов, ε — энергия электрона, $\tau_0 \approx 10^{-13}$–10^{-12} с — параметр порядка периода колебаний ядер. По (1) сродство к электрону восстанавливается с ошибкой 5–10 %.

С учётом приведённых масштабов времени и отсутствия столкновений анионов их распад описывается кинетическим уравнением

$$\frac{dM^-}{dt} = -(k_a + k_d)\, M^-$$

где M^- — число отрицательных молекулярных ионов, k_a и k_d — константы скорости автоотщепления и диссоциации. При исследуемых энергиях захвата электрона канал диссоциации подавлен, $k_d = 0$.

Обоснованием правомерности уравнения (1) являются следующие соображения. Энергия, выделяющаяся при захвате электрона (примерно 1 эВ), распределяется между большим числом колебательных степеней свободы иона (в рассматриваемом наборе молекул это число варьируется от 75 до 105). Это обеспечивает применимость гармонического приближения при описании автоотщепления электрона. Потенциальную энергию молекулы и иона представим в виде

$$U_M = \frac{1}{2}\sum_i \omega_i^2 x_i^2,$$

$$U_I = \frac{1}{2}\sum_i \omega_i^2 x_i^2 + \sum_i A_i x_i - E_0,$$

где ω_i и x_i — собственные частоты и координаты нормальных колебаний. Параметры A_i и E_0 определяют горизонтальное и вертикальное смещения термов. Процесс автоотщепления медленный и протекает в неадиабатическом режиме. В этом случае электронный переход происходит в узкой окрестности пересечения термов $U_M = U_I$, что даёт $\Sigma_i A_i x_i = E_0$. Удобно ввести координату реакции $\lambda y_1 = \Sigma_i A_i x_i$, где $\lambda^2 = \Sigma_i A_i^2$. Затем делаем преобразование к новым ортогональным координатам $y_\alpha = \Sigma_i B_{\alpha i} x_i$ и выбираем $B_{1i} = A_i/\lambda$. В результате потенциальная энергия ядер иона примет вид

$$U_I = \frac{1}{2}\Omega_1^2 y_1^2 + \sum_{\alpha>1} C_\alpha y_1 y_\alpha + \frac{1}{2}\sum_{\alpha>1}\Omega_\alpha^2 y_\alpha^2 + \lambda y_1 - E_0,$$

где $\Omega_1^2 = \lambda^2/\delta^2$, $\delta^2 = \Sigma_i A_i^2/\omega_i^2$; параметры $C_\alpha = \lambda^{-1}\Sigma_i B_{\alpha i} A_i \omega_i^2$ определяют масштаб взаимодействия моды, описываемой координатой реакции, с остальными осцилляторами, образующими «термостат». Условие пересечения термов иона и нейтральной молекулы даёт $\lambda y_1 = E_0$. Только движение по координате реакции y_1 приближает ион к области пересечения термов иона и молекулы, так как все остальные координаты ортогональны координате реакции. Захват электрона происходит в области пересечения термов $U_M = U_I$, и вся электронная энергия выделяется на моде, описываемой координатой реакции. Взаимодействие этой моды с термостатом ведёт к быстрой релаксации и далее к термализации колебательной подсистемы иона. Вследствие этого взаимодействия состояние моды может быть описано только в терминах матрицы плотности.

Взаимодействие координаты реакции с большим числом осцилляторов уменьшает длину когерентности (квантовую неопределённость вдоль координаты реакции), и она становится много меньше ширины распределения по координате реакции [4]. Это делает движение по ней близким к классическому.

Работа поддержана РНФ, грант № 25-62-00004. Исследованные соединения предоставлены А. Н. Родионовым (ИНЭОС РАН).

Литература

1. *Хвостенко В. И.* Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии. М.: Наука, 1981. 169 с.
2. *Asfandiarov N. L., Pshenichnyuk S. A., Vorob'ev A. S., Nafikova E. P., Modelli A.* // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2015. V. 29. P. 910–912.
3. *Пшеничнюк С. А., Асфандиаров Н. Л., Воробьев А. С., Матейчик Ш.* // УФН. 2022. Т. 192. С. 177.
4. *Иванов А. И., Михайлова В. А.* // Опт. и спектр. 1991. Т. 71. С. 444–451.

Понедельник, 2 ноября · 12:15 · результаты мастерской № 4

Кинетика спиновой поляризации триплетов Zn-порфиринов замедляется на порядок при почти неизменных параметрах расщепления в нулевом поле

Р. А. Подаров[1], И. В. Курганский[1], С. А. Дементьев[1], Н. Э. Санникова[1], К. А. Жданова[1,2], М. В. Федин[1], О. А. Крумкачева[1]

[1] *Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск*
[2] *МИРЭА — Российский технологический университет, Москва*
romalexeevich@gmail.com

Система. Три катионных мезо-арилпорфирина цинка(II) с пиридиниевыми группами на алкильных спейсерах, в которых последовательно меняется один структурный фактор: Zn2VOC4Py (два мезо-арила в транс-положениях, мезо-положения 5,15 не замещены, спейсер C4; соединение сравнения); SI1 (те же арилы, в мезо-положениях 5,15 фенилэтинильные группы, спейсер C4); SI2 (как SI1, спейсер C6); для оценки влияния металла — свободное основание SI4. Параметры расщепления в нулевом поле триплета T_1 ($|D|$, $|E|$, МГц, ±15): Zn2VOC4Py 955, 283; SI1 826, 177; SI2 865, 194; SI4 901, 157. Раствор в ДМСО (1 мМ), быстрое замораживание в жидком азоте, 80 K; возбуждение лазерными импульсами 532 нм (10 Гц, 3–5 мДж); ЭПР X-диапазона (9,7 ГГц). До импульса молекулы находятся в основном синглетном состоянии S_0; в результате интеркомбинационной конверсии (по литературным данным, за время порядка наносекунд) образуется состояние T_1 с неравновесными населённостями подуровней; ориентации молекул в замороженном растворе фиксированы и распределены случайно. Населённости T_x : T_y : T_z по спектру через 0,9 мкс после импульса: Zn2VOC4Py 0,12 : 0 : 0,88; SI2 0 : 0,23 : 0,77; SI1 0,87 : 0 : 0,13; SI4 0,46 : 0,54 : 0.

Наблюдаемые величины. ЭПР с временным разрешением: прямое детектирование без модуляции магнитного поля; при фиксированном поле регистрируется временная зависимость сигнала поглощения или излучения СВЧ после импульса, из которой вычитается сигнал, записанный в нерезонансном поле. В результате получается двумерный набор данных «поле — время». Анализируются спектры при разных задержках и кинетика в канонических положениях $Z_{\pm}$, $Y_{\pm}$, $X_{\pm}$. Аппаратное время отклика ∼0,5 мкс, первый спектр — через 0,9 мкс после импульса; двумерный анализ выполнен на интервале до ∼170 мкс для Zn2VOC4Py и до ∼860 мкс для остальных соединений, время жизни оценено по записям длительностью до 1,7–3,5 мс.

Характерные времена. Когерентная спиновая динамика (период ларморовой прецессии $\sim 10^{-10}$ с, расщепление в нулевом поле $\sim 10^{-9}$ с) на 3–4 порядка быстрее изменения населённостей подуровней (10^{-6}–10^{-3} с); все процессы на 2–5 порядков быстрее периода повторения импульсов 0,1 с. Времена биэкспоненциальной аппроксимации кинетики: Zn2VOC4Py 3,4 и 21 мкс; SI2 9,1 и 102 мкс; SI1 40,8 и 503 мкс; SI4 8,3 и 210 мкс. Время фазовой релаксации T_2 при 80 K не измерено; время жизни триплета прямо не измерялось и оценено только в рамках кинетической модели: 0,42–1,2 мс для соединений с фенилэтинильными группами и ≈9 мс для Zn2VOC4Py. Характерные времена молекулярных движений, модулирующих спиновый гамильтониан, неизвестны. В качестве медленных переменных рассматриваются населённости трёх подуровней для каждой ориентации молекулы (эквивалентно: мультиплетная и интегральная поляризация и полная населённость триплета) и, возможно, населённости двух близких по энергии электронных конфигураций квазивырожденного триплета Zn-порфирина.

Модель. Кинетическое уравнение для населённостей трёх подуровней $\mathrm{d}n_i/\mathrm{d}t = -k_i n_i + \Sigma_j W_{ij}(n_j - n_i)$, записанное для каждой ориентации молекулы в сильном магнитном поле, даёт сигнал с двумя основными компонентами: быстрой со скоростью ≈ $3/T_1 + k_{ср}$ и медленной со скоростью ≈ $k_{ср}$, которая проявляется только при различии скоростей гибели подуровней. С одним значением T_1 модель не описывает ни одно из соединений (χ^2_r = 1,6–8,2); при распределении T_1 по ансамблю молекул, общем для всех точек спектра, данные всех четырёх соединений описываются в пределах шума (χ^2_r = 0,63–0,96). Модель не указывает, какие движения определяют W. По нашим оценкам, модуляция тензора расщепления либрациями (модель Редфилда) при одинаковой спектральной плотности объясняет различие времён релаксации не более чем в 1,3–2,6 раза, а спин-орбитальный механизм — не более чем в 1,5–2,4 раза; по сравнению с Pd(II)-комплексами родственной серии его вклад составляет лишь несколько процентов. Исключены: зависимость скорости релаксации от

D^2 (даёт различие лишь ∼1,2 раза), примесь свободного основания в SI1 (у SI4 другие D и E), два независимых триплета с разными D и E в SI1 (спектры через 0,9 мкс и после 70 мкс описываются одними параметрами расщепления в нулевом поле).

Что не сходится. У Zn-комплексов с фенилэтинильными группами $|D|$ меньше лишь на 9–14 %, но среднее время спин-решёточной релаксации T_1 возрастает с 10–12 до 200–450 мкс, а начальная скорость потери поляризации уменьшается в 7–18 раз. SI1 и SI2 различаются только длиной спейсера, их D и E отличаются на 5–10 %, однако в SI1 преимущественно заселён подуровень T_x (0,87), а в SI2 — T_z (0,77); медленные компоненты биэкспоненциальной аппроксимации различаются в 5 раз (503 и 102 мкс), тогда как оценки времени жизни по кинетической модели близки (0,42 и 0,45 мс). У SI1 за первые ∼50 мкс сигнал меняет знак в пяти из шести канонических положений, и распределение населённостей переходит от 0,87 : 0 : 0,13 к 0,31 : 0 : 0,69 при неизменных D и E; у SI2 кинетика монотонна. Фосфоресценция родственных катионных порфиринов при 77 K длится 6–33 мс, что в 5–80 раз больше оценок времени жизни триплета соединений с фенилэтинильными группами (0,42–1,2 мс). Вопросы к мастерской: какие медленные переменные и какое кинетическое уравнение описывают затухание поляризации, если оно не определяется величиной D; описывается ли затухание одной кинетической системой или распределением скоростей по ансамблю; нужна ли переменная, описывающая конфигурацию, искажённую эффектом Яна–Теллера; какие движения создают спектральную плотность на частотах порядка гигагерц и почему она зависит от фенилэтинильных групп и длины спейсера; отражает ли медленная компонента гибель триплета или релаксацию. Возможные измерения: температурная зависимость T_1 при 80–160 K, зависимость кинетики от мощности СВЧ, прямое измерение T_1 методом инверсии–восстановления в X- и Q-диапазоне, ориентационная зависимость T_1, время жизни триплета по затуханию больцмановского поглощения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00627).

Литература

1. *Подаров Р. А., Курганский И. В., Дементьев С. А., Санникова Н. Э., Жданова К. А., Федин М. В., Крумкачева О. А.* Влияние фенилэтинильного замещения на триплетные состояния катионных порфиринов по данным ЭПР с временным разрешением (рукопись на рецензии).
2. *Matsuoka H. et al.* // J. Am. Chem. Soc. 2017. V. 139. P. 12968.
3. *Yamauchi A. et al.* // J. Phys. Chem. A. 2021. V. 125. P. 4334.
4. *Miyokawa K., Kurashige Y.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2026. V. 28. P. 1230.
5. *Panariti D. et al.* // J. Chem. Phys. 2025. V. 162. 114201.
6. *Kandrashkin Y. E., Di Valentin M., van der Est A.* // J. Chem. Phys. 2020. V. 153. 094304.
7. *Hautle P., Wenckebach W. Th.* // J. Magn. Reson. 2026. V. 389. 108096.

Указатель авторов

Агаларов А. М. — 25
Алисултанов З. З. — 25
Астафьев О. — 36
Асфандиаров Н. Л. — 43, 48
Бочкин Г. А. — 31
Бражкин В. В. — 39
Брекоткин И. В. — 21
Васин М. Г. — 15
Волков В. И. — 34
Вопиловский А. М. — 11
Габбасов Б. Ф. — 26
Гаджимурадов Т. Т. — 25
Гениман М. П. — 11
Герасимов К. И. — 21
Гумаров А. И. — 26
Дементьев С. А. — 50
Демишев С. В. — 14
Джамалудинов М. Р. — 23
Жданова К. А. — 50
Иванов А. В. — 33, 48
Иванов А. И. — 12, 48
Игнатьев В. К. — 12
Игошин О. А. — 22
Кинзибаев Р. — 36
Кирютин А. С. — 11
Киямов А. Г. — 26
Ковычева Е. И. — 17
Колоколов И. В. — 37
Криссинель Е. Б. — 22
Крумкачева О. А. — 50
Кудрявцева А. Д. — 35
Кузнецов В. В. — 41
Курганский И. В. — 50
Лебедев В. Ф. — 35, 44
Ли Р. В. — 22, 45
Лукзен Н. Н. — 11
Лукьянов А. В. — 33
Магомедов М. А. — 23
Мельников А. С. — 36
Мещерякова Е. С. — 41
Миннегалиев М. М. — 21
Мисникова Т. С. — 35
Моисеев С. А. — 21
Муртазаев А. К. — 23
Муртазаев К. Ш. — 23
Муфтахов М. В. — 43, 48
Назаров А. Е. — 12
Наумов А. В. — 38
Подаров Р. А. — 50
Пулотов Ж. Х. — 26
Пуртов П. А. — 28
Пшеничнюк С. А. — 43, 48
Радионычев Е. В. — 16
Рамазанов М. К. — 23
Рыбин Д. С. — 20
Саларидзе А. Э. — 35
Салихов К. М. — 9, 28, 29
Санникова Н. Э. — 50
Сидоров К. П. — 24
Смирнов А. И. — 32
Соловаров Н. К. — 40
Тагиров Л. Р. — 19, 26
Тюмкина Т. В. — 41
Уманская С. Ф. — 35
Усеинов Н. Х. — 27
Федин М. В. — 50
Фельдман Э. Б. — 31
Французов П. А. — 13, 22
Фролов И. А. — 28
Халилов Л. М. — 41
Хеннер В. К. — 17
Циберкин К. Б. — 17
Чернега Н. В. — 35
Юрковская А. В. — 11
Юсупов Р. В. — 26
Янилкин И. В. — 26

Международный симпозиум «От квантовой динамики к макроскопической кинетике»,
приуроченный к 90-летию академика РАН Кева Минуллиновича Салихова.
Казань, 30 октября – 3 ноября 2026 г.

Программа: дизайн и макет — ИП Аксёнов И.А., 2026.
Составление сборника тезисов и вёрстка электронного издания — ИП Салихова А.К., 2026.
Тезисы публикуются в авторской редакции с единообразным оформлением.