

Volume 5 • Number 1 • 2018

ISSN 2312-4334

---

# **East European Journal of Physics**

---



**V.N. Karazin Kharkiv National University Publishing**

ISSN 2312-4334

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

# **East European Journal of Physics**

Volume 5 · Number 1

2018

# East European Journal of Physics

---

EEJP is an international peer-reviewed journal devoted to experimental and theoretical research on the nuclear physics, cosmic rays and particles, high-energy physics, solid state physics, plasma physics, physics of charged particle beams, plasma electronics, radiation materials science, physics of thin films, condensed matter physics, functional materials and coatings, medical physics and physical technologies in an interdisciplinary context.

Published quarterly in hard copy and online by V.N. Karazin Kharkiv National University Publishing.  
ISSN 2312-4334 (Print), ISSN 2312-4539 (Online)

The editorial policy is to maintain the quality of published papers at the highest level by strict peer review.

Approved for publication by the Academic Council of the Karazin Kharkiv National University (January 19, 2018, Protocol No. 1). EEJP registered by the order of Ministry of Education of Ukraine № 747 of 07.13.2015, and is included in the list of scientific specialized editions of Ukraine, which can be published results of dissertations for the degree of doctor and candidate of physical and mathematical sciences.

## Editor-in-Chief

Azarenkov N.A., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

## Deputy editor

Girka I.O., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

## Executive Secretary

Girnyk S.A., Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

## Editorial Board

Adamenko I.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Akulov V.P., City University of New York, USA

Antonov A.N., Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria

Barannik E.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Beresnev V.M., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Berezhnoy Yu.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Bizyukov A.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Bragina L.L. STU Kharkiv Polytechnical Institute, Ukraine

Broda B., University of Lodz, Poland

Budagov Yu.A., Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia

Dovbnya A.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Dragovich B.G., University of Belgrade, Serbia

Duplij S.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Garkusha I.E., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Gofman Yu., Jerusalem College of Technology, Israel

Grekov D.L., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Karnaukhov I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Khodusov V.D., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Kondratenko A.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Korchin A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Krivoruchenko M.I., Institute for Theoretical and Experimental Physics, Moscow, Russia

Lavrinenko S.D., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Lazurik V.T., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Mel'nik V.N., Institute of Radio Astronomy, Kharkiv, Ukraine

Merenkov N.P., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Neklyudov I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Noterdaeme J.-M., Max Planck Institute for Plasma Physics, Garching, Germany

Nurmagambetov A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Onyschenko I.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Ostrikov K.N., Plasma Nanoscience Centre Australia, Clayton, Australia

Peletminsky S.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Pilipenko N.N., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Radinschi I., Gheorghe Asachi Technical University, Iasi, Romania

Slyusarenko Yu.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Smolyakov A.I., University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada

Shul'ga N.F., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Tkachenko V.I., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Voyevodin V.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Yegorov O.M., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

## Editorial office

Department of Physics and Technologies, V.N. Karazin Kharkiv National University

Kurchatov av., 31, office 402, Kharkiv, 61108, Ukraine

Tel: +38-057-335-18-33,

E-mail: [eejp@karazin.ua](mailto:eejp@karazin.ua),

Web-pages: <http://periodicals.karazin.ua/eejp> (Open Journal System), <http://eejp.univer.kharkov.ua>

Certificate of State registration No.20644-10464P, 21.02.2014

# East European Journal of Physics

Volume 5

Number 1

2018

---

## ORIGINAL PAPERS

**Polarization Phenomena in Process  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$**  4

G.I. Gakh, M.I. Konchatnij, N.P. Merenkov, A.G. Gakh

**Current Status of  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  Study. Experiment and Theory** 28

O.N. Shekhovtsova

**Manifestation of Nuclear Clusterization in Coulomb Sums** 36

A.Yu. Buki, I.S. Timchenko

**Novel Cyanine Dyes as Potential Amyloid Probes: a Fluorescence Study** 41

U. Tarabara, K. Vus, A. Kurutos, O. Ryzhova, V. Trusova, G. Gorbenko, N. Gadjev, T. Deligeorgiev

**Modelization of Amyloid Fibril Self-Assembly** 47

V. Trusova, G. Gorbenko

**Physical and Thermodynamic Properties of Pb-Sb Alloys** 55

N.Yu. Filonenko

**Modeling Radiation-Induced Segregation in Binary Alloys** 61

R.V. Skorokhod, O.M. Buhay, V.M. Bilyk, V.L. Denysenko, O.V. Koropov

**Reduced Isotropic Crystal Model with Respect to the Fourth-Order Elastic Moduli** 70

O. Burlayenko, V. Khodusov, A. Naumovets

**Model of a Dipole with Atomic Structure** 74

D.O. Vasylenko, V.S. Sydorenko, P.O. Kravchuk, V.I. Grygoruk, V.I. Kanevskii

## HISTORY OF SCIENCE

**It's Worth Remembering: "This Never Was Not in The USSR". - Ukraine, Kharkov, UPTI** 85

A. Tan'shyna

## PERSONALITIES

**Mykola Fedorovych Shul'ga (70<sup>th</sup> anniversary of birth)** 102

PACS: 12.20.-m, 13.40.-f, 13.60.-Hb, 13.88.+e

## POLARIZATION PHENOMENA IN PROCESS $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$

G.I. Gakh<sup>1,2</sup>, M.I. Konchatnij<sup>1,2</sup>, N.P. Merenkov<sup>1,2</sup>, A.G. Gakh<sup>2</sup>

<sup>1</sup>NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

Akademicheskaya, 1, 61108 Kharkov, Ukraine

<sup>2</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University, 61022 Kharkov, Ukraine

e-mail: [konchatnij@kipt.kharkov.ua](mailto:konchatnij@kipt.kharkov.ua)

Received December 14, 2017

The emission of the hard photon from the initial state is considered. The nucleon polarization and the differential cross sections for some experimental conditions have been calculated. The case of the emission of the collinear (with respect to the direction of the electron beam momentum) photon is considered separately. The differential cross section, the nucleon polarization, the correlation coefficients for both polarized nucleons (provided the electron beam is unpolarized or longitudinally polarized), the transfer polarization from the longitudinally polarized electron beam to the nucleon have been calculated. The photon energy distribution for the reaction  $e^+e^- \rightarrow h_1h_2\gamma$ , where  $h_1$  and  $h_2$  are some hadrons for the case of the collinear photon, emitted in the initial state, has been calculated. As  $h_1h_2$  final state we considered some channels, namely: two spinless mesons (for example,  $\pi^+\pi^-, K^+K^-$ ), two spin-one particles (for example,  $\rho^+\rho^-, d\bar{d}$ ), and the channels  $\pi a_1(1260)$  and  $\Delta(1232)\bar{N}$ . The photon energy distributions are calculated in terms of the form factors of the  $\gamma^* \rightarrow h_1h_2$  transition ( $\gamma^*$  is the virtual photon).

**KEY WORDS:** polarization phenomena, electron, nucleon, radiative return, form factors, hard photon

### ПОЛЯРИЗАЦІЙНІ ЯВИЩА У ПРОЦЕСІ $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$

Г.І. Гах<sup>1,2</sup>, М.І. Кончатний<sup>1,2</sup>, Н.П. Меренков<sup>1,2</sup>, А.Г. Гах<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

61108 Україна, м. Харків, вул. Академічна, 1

<sup>2</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

61022, Україна, м. Харків, пл. Свободи, 4

Розглянуто випромінювання жорсткого фотону у початковому стані. Обчислені диференційні перерізи і поляризація нуклона для деяких експериментальних умов. Окремо розглянуто випадок випромінювання колінеарного (по відношенню до напрямку імпульсу електронного пучка) фотона. Обчислені диференційний переріз, поляризація нуклона, коефіцієнти кореляції для випадку, коли поляризовані обидва нуклона (при умові, що електронний пучок неполяризований або поздовжньо поляризований), передача поляризації від поздовжньо поляризованого електронного пучка до нуклону. Для випадку колінеарного фотона, який випромінюється у початковому стані, обчислено енергетичний розподіл фотона для реакції  $e^+e^- \rightarrow h_1h_2\gamma$ , де  $h_1$  і  $h_2$  є деякі адрони. В якості кінцевого стану  $h_1h_2$  розглянуті деякі канали, а саме: два безспінових мезона (наприклад,  $\pi^+\pi^-, K^+K^-$ ), дві частинки зі спіном одиниця (наприклад,  $\rho^+\rho^-, d\bar{d}$ ),  $\pi a_1(1260)$  і  $\Delta(1232)\bar{N}$  канали. Енергетичні розподіли фотона обчислені у термінах формфакторів  $\gamma^* \rightarrow h_1h_2$  переходу ( $\gamma^*$  віртуальний фотон).

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** поляризаційні явища, електрон, нуклон, радіаційне повернення, формфактори, жорсткий фотон

### ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$

Г.И. Гах<sup>1,2</sup>, М.И. Кончатный<sup>1,2</sup>, Н.П. Меренков<sup>1,2</sup>, А.Г. Гах<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

61108, Украина, г. Харьков, ул. Академическая, 1

<sup>2</sup>Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина

61022, Украина, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Рассмотрено излучение жесткого фотона в начальном состоянии. Вычислены дифференциальные сечения и поляризация нуклона для некоторых экспериментальных условий. Отдельно рассмотрен случай излучения коллинеарного (по отношению к направлению импульса электронного пучка) фотона. Вычислены дифференциальное сечение, поляризация нуклона, коэффициенты корреляции для случая, когда поляризованы оба нуклона (при условии, что электронный пучок неполяризован или продольно поляризован), передача поляризации от продольно поляризованного электронного пучка к нуклону. Для случая коллинеарного фотона излученного в начальном состоянии вычислено энергетическое распределение фотона для реакции  $e^+e^- \rightarrow h_1h_2\gamma$ , где  $h_1$  и  $h_2$  есть некоторые адроны. В качестве конечного состояния  $h_1h_2$  рассмотрены некоторые каналы, а именно: два безспиновых мезона (например,  $\pi^+\pi^-, K^+K^-$ ), две частицы со спином единица (например,  $\rho^+\rho^-, d\bar{d}$ ),  $\pi a_1(1260)$  и  $\Delta(1232)\bar{N}$  каналы. Энергетические распределения фотона вычислены в терминах формфакторов  $\gamma^* \rightarrow h_1h_2$  перехода ( $\gamma^*$  виртуальный фотон).

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** поляризационные явления, электрон, нуклон, радиационный возврат, форм-факторы, жесткий фотон

The investigation of the electromagnetic form factors of the proton and neutron in both the space-like and time-like regions of the momentum transfer squared is important for the understanding of the internal structure of these particles and for the interpretation of many data on reactions with participation of the nucleons. The knowledge of the nucleon form factors is also required for the interpretation of the nuclear structure and various measurements of the reactions involving nuclei. So, the experimental determination of the elastic nucleon electromagnetic form factors in the region of small and large momentum transfer squared is one of the major fields of research in hadron physics [1].

The measurement of the nucleon electromagnetic form factors in the space-like region of the momentum transfer squared has a long history. The electric and magnetic form factors were determined both for the proton and neutron using two different techniques: the Rosenbluth separation [2, 3] and polarization transfer method [4-7]. It turned out that the measurements of the ratio of the proton electric and magnetic form factors using these two methods lead to the appreciably different results, and this difference is increasing when  $Q^2$  (the four-momentum transfer squared) grows. The ratio  $G_E^p / G_M^p$  is monotonically decreasing with increasing  $Q^2$  suggesting crossing zero at  $Q^2 \approx (8-9) GeV^2$  [8]. These unexpected results revived an experimental and theoretical investigations of this problem (see reviews [1, 9]). One possible mechanism suggested for the explanation of this discrepancy is the two-photon-exchange contribution to the elastic electron-nucleon scattering [10, 11]. Other considerations lead to the conclusion that the contribution from the two-photon term is too small at the  $Q^2$  values of interest [12] and/or lead to a definite non-linearity in the Rosenbluth plot which has not been seen in the data so far [13]. A model independent study of the two-photon-exchange mechanism in the elastic electron-nucleon scattering and its consequences on the experimental observables has been carried on in Refs. [14-16], and in the crossed channels: proton-antiproton annihilation into the lepton pair [17] and annihilation of the electron-positron pair into the nucleon-antinucleon [18].

The data on nucleon form factors in the time-like region are not numerous. So, the separation the electric and magnetic form factors in this region has not yet been done. One of the reasons is the limitation in the intensity of antiproton beams and of the luminosity of electron-positron colliders.

Nevertheless, a few unexpected results have been observed in the measurements of the nucleon form factors in the time-like region (note that the accuracy of the data set is not sufficiently good to do definite statements). Despite of the relation  $|G_E| = |G_M|$ , which must be valid at the threshold of the  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}$  reaction, the neutron electric form factor is negligible near the threshold as may be suggested from the measurement of the differential cross section. The general behavior of the neutron time-like form factors is rather unexpected. The proton magnetic form factor is smaller than the neutron one at  $q^2 \leq 6 GeV^2$  (where experiments were done). The review of the present status in this field of investigations is given in [1]. Note also that in the time-like region the proton magnetic form factor is considerably bigger than the corresponding space-like quantity.

Recent experimental data on the nucleon form factors (both in the space- and time-like regions) together with new theoretical developments [19] (where the analytic continuation of the QCD formulas from the space-like region of momentum transfer to the time-like one was discussed) show the necessity of a global description of the nucleon form factors in the full region of the  $q^2$  variable. Some papers were already appeared [20, 21, 22].

The experimental data on the time-like form factors may turn out to be very sensitive to the details of existing models. For example, the analysis, performed in [23], taking into account the combined space-like and time-like data on the proton and neutron form factors leads to a good fit to the space-like form factors but cannot describe neutron time-like data.

So, the experimental investigation of the nucleon form factors in the time-like region may give additional valuable information about the internal nucleon structure and can test the existing models.

In the time-like region, the nucleon form factors can be measured using the reactions  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}$  or  $\bar{p}p \rightarrow e^+e^-$ . In this region only a small set of data exists. The neutron form factors were measured by the FENICE collaboration [24], using the ADONE  $e^+e^-$  collider in Frascati. The reaction  $e^+e^- \rightarrow n\bar{n}$  was studied up to  $q^2 \approx 6 GeV^2$  starting with reaction threshold. The proton form factors were measured in a broader region of  $q^2$  values. The region of the large  $q^2$  was achieved with the help of  $\bar{p}p \rightarrow e^+e^-$  reaction: Fermilab experiment E835 measured the cross section of this reaction up to  $q^2 = 18.22 GeV^2$  [25].

Some experiments are planning to study this region of  $q^2$ . A new experiment at an asymmetric collider is proposed at SLAC with the ambitious goal to measure the nucleon form factors from threshold up to 3 GeV with the same accuracy currently available in the space-like region [26].

The chance of measuring these form factors with higher precision will be given by a suitable upgrade of DAΦNE energy [27]. The number of good detectable events per day is about, or exceeding, the total amount of events collected by FENICE in all its data takings.

FINUDA planned to offer a unique possibility - a measurement of the nucleon polarization [27]. This kind of measurement would be of great interest, as it would be a handle to infer something about the relative phases of  $G_M$  and

$G_E$  form factors.

As it is known, the  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}$  reaction is the cross channel for the reaction of the elastic electron–nucleon scattering. The form factors describing the annihilation channel are assumed to be the analytical continuation of the space–like ones. So, one may expect that the problems existed in the scattering channel will also manifest itself in the annihilation channel. It concerns, in particular, the problem of the two–photon–exchange contribution.

Theoretically, the reaction  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}$  was studied in a number of papers. The dependence of polarization states of created one–half spin baryons in the  $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}$  reaction on the polarization of colliding  $e^+e^-$  - beams was investigated in [28]. The formulae obtained in this paper exhaust all polarization effects of baryons with spin 1/2 in the  $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}$  reaction. Numerical estimates of polarization effects were presented only for the nucleons. The polarization effects appear to be very sensitive to the choice of the nucleon form factors parametrization and are rather large in absolute value. The pronounced energy dependence measured in the cross section of the reactions  $e^+e^- \rightarrow p\bar{p}$  investigated in [29] in the near-threshold region. The authors considered the role of the antinucleon–nucleon interaction in the initial- or final state using  $N\bar{N}$  potential derived within chiral effective field theory.

The existence of the T–odd single–spin asymmetry normal to the reaction scattering plane requires a non–zero phase difference between the electric and magnetic form factors. The measurement of the polarization of one of the outgoing nucleons allows to determine the phase of the ratio  $G_E / G_M$ . In [30] it was shown that measurements of the proton polarization in  $e^+e^- \rightarrow p\bar{p}$  reaction strongly discriminate between the analytic forms of models suggested to fit the proton data in the space–like region.

As it is known, the problem of taking into account the radiative corrections in the elastic electron–nucleon scattering is important for the reliable extraction of the nucleon form factors. The same is valid for the crossed channel. The importance of the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$  reaction is not only due to the fact that it is a part of the radiative corrections to the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  reaction but rather because it allows to measure the nucleon form factors by the radiative return method [31].

Purpose of our research is to apply the method of radiative return for the scanning of the cross section and polarization observables in the process of electron–positron annihilation into nucleon–antinucleon and other hadronic channels to measure corresponding hadronic form factors in the time–like region.

In this paper we investigate the polarization phenomena in the reaction

$$e^-(k_1) + e^+(k_2) \rightarrow N(p_1) + \bar{N}(p_2) + \gamma(k), \quad (1)$$

where four–momenta of the corresponding particles are given in the brackets. We consider here the emission of the additional hard photon by the initial electron or positron since the emission of the photon by the final state particles is model dependent and suppressed with respect to the initial state radiation due to the large nucleon mass as compared with electron one and perhaps by the nucleon form factors.

Here we derive the expressions for the differential cross section and various polarization observables taking into account the nucleon form factors.

We consider a particular case of the high–energy photon emission at small angles (the radiative return). The differential cross section and various polarization observables (the nucleon polarization, the correlation coefficients for the nucleon–antinucleon pair and polarization transfer from the longitudinally polarized electron to the nucleon), when the angular distribution of the nucleon and energy of the emitted photon are measured, have been calculated for the case of the photon emitted at small angles relative to the electron beam momentum.

The standard analysis of the experimental data requires the account for all possible systematic uncertainties. One of the important source of such uncertainties are the electromagnetic radiative effects caused by physical processes which take place in higher orders of the perturbation theory with respect to the electromagnetic interaction. In present paper we calculate the model–independent QED radiative corrections to the observables (both polarized and unpolarized). Our approach is based on the covariant parametrization of the nucleon or antinucleon spin four–vectors in terms of the four–momenta of the particles in process (1) [32, 33].

The photon energy distribution for the reaction  $e^+e^- \rightarrow h_1 h_2 \gamma$ , where  $h_1$  and  $h_2$  are some hadrons for the case of the collinear photon, emitted in the initial state, has been calculated. As  $h_1 h_2$  final state we considered some channels, namely: two spinless mesons (for example,  $\pi^+ \pi^-, K^+ K^-$ ), two spin–one particles (for example,  $\rho^+ \rho^-, d\bar{d}$ ), the  $\pi a_1(1260)$  and  $\Delta(1232)\bar{N}$  channels. The photon energy distributions are calculated in terms of the form factors of the  $\gamma^* \rightarrow h_1 h_2$  transition ( $\gamma^*$  is the virtual photon).

The paper is organized as follows. In Section “POLARIZATION PHENOMENA IN  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$ ” the polarization phenomena for the Born approximation, i.e., for the reaction  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  are given. In Section “HARD–PHOTON EMISSION” the emission of the hard photon by the initial state is considered. The nucleon

polarization and the differential cross sections for some experimental conditions have been calculated. In Section “RADIATIVE RETURN. SMALL ANGLES” the emission of the collinear photon is considered in details. The differential cross section and various polarization observables have been calculated. In Section “PHOTON ENERGY DISTRIBUTION” we have calculated the photon energy distribution for the reaction  $e^+e^- \rightarrow h_1h_2\gamma$ , where  $h_1$  and  $h_2$  are some hadrons for the case of the collinear photon, emitted in the initial state. As  $h_1h_2$  final state we consider some channels. In Section “RADIATIVE RETURN. LARGE ANGLES” the emission of the collinear photon at large angles is considered. The main results are summarized in Section “CONCLUSIONS”.

### POLARIZATION PHENOMENA IN $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$

Let us consider first the production of  $N\bar{N}$ -pair without emission of additional photons:

$$e^-(k_1) + e^+(k_2) \rightarrow N(p_1) + \bar{N}(p_2), \quad (2)$$

where four-momenta of the corresponding particles are given in the brackets. The matrix element of this reaction can be written as follows

$$M = i4\pi \frac{\alpha}{q^2} j_\mu J_\mu, \quad (3)$$

where  $\alpha = e^2 / 4\pi = 1/137$ ,  $q = k_1 + k_2 = p_1 + p_2$  is the virtual photon four-momentum. The leptonic and hadronic currents can be written as

$$j_\mu = \bar{v}(k_2)\gamma_\mu u(k_1), \quad (4)$$

$$J_\mu = \bar{u}(p_1)[F_1(q^2)\gamma_\mu - \frac{1}{2M}F_2(q^2)\sigma_{\mu\nu}q_\nu]v(p_2),$$

where  $\sigma_{\mu\nu} = (\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)/2$ ,  $M$  is the nucleon mass and  $F_1(q^2)$  and  $F_2(q^2)$  are the Dirac and Pauli nucleon electromagnetic form factors, respectively, which are the complex functions of the variable  $q^2$ . The complexity of the form factors arises due to the final-state strong interaction of the produced  $N\bar{N}$ -pair. In the following, we use the standard magnetic  $G_M(q^2)$  and charge  $G_E(q^2)$  nucleon form factors which are related to the form factors  $F_1(q^2)$  and  $F_2(q^2)$  as follows

$$G_M = F_1 + F_2, G_E = F_1 + \tau F_2, \tau = \frac{q^2}{4M^2}. \quad (5)$$

Then, the differential cross section of the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  reaction, for the case of the polarized electron beam and unpolarized positron beam, can be written as follows in the reaction centre of mass system (CMS)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{8q^6} \beta L_{\mu\nu} H_{\mu\nu}, \quad (6)$$

where  $\beta$  is the nucleon velocity in CMS,  $\beta = \sqrt{1 - 4M^2/q^2}$ , and the leptonic and hadronic tensors are defined as

$$L_{\mu\nu} = j_\mu j_\nu^*, H_{\mu\nu} = J_\mu J_\nu^*.$$

The leptonic tensor for the case of longitudinally polarized electron beam has the form (other components of the electron polarization lead to the observables suppressed by a factor  $m/M$ , where  $m$  is the electron mass)

$$L_{\mu\nu} = -q^2 g_{\mu\nu} + 2(k_{1\mu}k_{2\nu} + k_{1\nu}k_{2\mu}) + 2i\lambda_e \langle \mu\nu q k_2 \rangle, \quad (7)$$

where  $\langle \mu\nu ab \rangle = \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} a_\rho b_\sigma$  and  $\lambda_e$  is the degree of the electron longitudinal polarization (we use the following definition for the antisymmetric tensor  $\varepsilon_{1230} = 1$ ).

Taking into account the polarization states of the produced nucleon and antinucleon, the hadronic tensor can be written as a sum of four contributions as follows:



$$H_{\mu\nu} = \frac{1}{4}H_{\mu\nu}(0) + \frac{1}{2}H_{\mu\nu}(1) + \frac{1}{2}\bar{H}_{\mu\nu}(1) + H_{\mu\nu}(2), \quad (8)$$

where the tensor  $H_{\mu\nu}(0)$  describes the production of unpolarized nucleon and antinucleon, the tensor  $H_{\mu\nu}(1)(\bar{H}_{\mu\nu}(1))$  describes the production of polarized nucleon (antinucleon) and the tensor  $H_{\mu\nu}(2)$  corresponds to the production of polarized particles, nucleon and antinucleon.

Let us consider the production of unpolarized  $N\bar{N}$  – pair as a result of annihilation of unpolarized  $e^+e^-$  – pair. In this case the general structure of the hadronic tensor can be written as

$$H_{\mu\nu}(0) = H_1\tilde{g}_{\mu\nu} + \frac{1}{M^2}H_2\tilde{p}_{1\mu}\tilde{p}_{1\nu}, \quad (9)$$

where  $\tilde{g}_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} - q_\mu q_\nu / q^2$  and  $\tilde{p}_{1\mu} = p_{1\mu} - q \cdot p_1 q_\mu / q^2$ . One can get the following expressions for these structure functions for the case of the hadronic current given by Eq. (4)

$$H_1(q^2) = -2q^2 |G_M(q^2)|^2, H_2(q^2) = \frac{8M^2}{1-\tau} [\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2]. \quad (10)$$

Then, the contraction of the leptonic and hadronic tensors, in the case of unpolarized initial beams and produced nucleon and antinucleon, can be written as

$$S(0) = L_{\mu\nu}H_{\mu\nu}(0) = -2q^2H_1(q^2) + H_2(q^2)[(\tau-1)q^2 - \frac{(u-t)^2}{4M^2}],$$

where  $u = (k_1 - p_2)^2$  and  $t = (k_1 - p_1)^2$ .

The differential cross section of the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  reaction, for the case of unpolarized particles, has the form in CMS

$$\frac{d\sigma_{un}}{d\Omega} = \frac{\alpha^2\beta}{4q^2}D, \quad (11)$$

$$D = (1 + \cos^2\theta) |G_M(q^2)|^2 + \frac{1}{\tau} \sin^2\theta |G_E(q^2)|^2,$$

where  $\theta$  is the angle between the electron and detected nucleon momenta in the  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$  reaction CMS. This expression coincides with the result for the differential cross section obtained in Ref. [28]. At the threshold of the reaction,  $q^2 = 4M^2$ , we have  $G_M = G_E = G$  (this relation follows from the definition (5)) and the formula (11) reduced to (near the threshold)

$$\frac{d\sigma_{un}^{th}}{d\Omega} = \frac{\alpha^2\beta}{2q^2}D^{th}, D^{th} = |G|^2. \quad (12)$$

Integrating the expression (11) over the angular variables, we obtain the total cross section for the reaction  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$

$$\sigma_{un}(q^2) = \frac{4\pi}{3} \frac{\alpha^2\beta}{q^2} [|G_M(q^2)|^2 + \frac{2M^2}{q^2} |G_E(q^2)|^2]. \quad (13)$$

Now, let us consider the single polarization observables. To do this, it is necessary to calculate the hadronic tensor for the case when produced nucleon is polarized. We can write this tensor as a sum of two terms: one is symmetrical and another one is antisymmetrical (over  $\mu$  and  $\nu$  indices)

$$H_{\mu\nu}(1) = S_{\mu\nu} + iA_{\mu\nu},$$

$$S_{\mu\nu} = \frac{2}{M} \frac{1}{1-\tau} \text{Im} G_E G_M^* (\tilde{p}_{1\mu} a_\nu + \tilde{p}_{1\nu} a_\mu), \tag{14}$$

$$A_{\mu\nu} = 2M \text{Re} G_E G_M^* \langle \mu\nu q s_1 \rangle + \frac{1}{M} \frac{q \cdot s_1}{1-\tau} [ |G_M|^2 - \text{Re} G_E G_M^* ] \langle \mu\nu p_1 q \rangle,$$

where  $a_\mu = \varepsilon_{\mu\nu\lambda\sigma} p_{1\nu} p_{2\lambda} s_{1\sigma}$  and  $s_{1\mu}$  is the nucleon polarization four-vector and  $s_1 \cdot p_1 = 0, s_1^2 = -1$ .

Let us define the coordinate frame in CMS of the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  reaction. The  $z$  axis is directed along the momentum of the nucleon ( $\vec{p}$ ),  $y$  axis is orthogonal to the reaction plane and directed along the vector  $\vec{k} \times \vec{p}$ , where  $\vec{k}$  is the electron momentum, and the  $x$  axis forms a left-handed coordinate system. Therefore, the components of the unit vectors are:  $\hat{p} = (0, 0, 1)$  and  $\hat{k} = (-\sin\theta, 0, \cos\theta)$  with  $\hat{p} \cdot \hat{k} = \cos\theta$ .

The polarization 4-vector  $s_{1\mu}$  of a nucleon in the system where it has momentum  $\vec{p}$  is connected with the polarization vector  $\vec{\chi}_1$  in its rest frame by a Lorentz boost

$$\vec{s}_1 = \vec{\chi}_1 + \frac{\vec{p} \cdot \vec{\chi}_1 \vec{p}}{M(E+M)}, s_{10} = \frac{1}{M} \vec{p} \cdot \vec{\chi}_1. \tag{15}$$

Let us note that four-vector  $s_{1\mu}$  can be written down as

$$s_{1\mu} = \sum s_{1\mu}^{(i)} \chi_{i\mu}, \quad i = x, y, z.$$

Each four-vector  $s_{1\mu}^{(i)}$  satisfies the following conditions

$$s_{1\mu}^{(i)} \cdot p_1 = 0, s_{1\mu}^{(i)2} = -1.$$

Note that the polarization 4-vectors of the particles can be parameterized in terms of the four-momenta of these particles in the reaction under study (it is very convenient when calculating the radiative corrections to this reaction). Let us write the chosen axes in a covariant form in terms of the four-momenta. So, in the reaction CMS we choose the longitudinal direction  $\vec{l}$  ( $z$  axis) along the nucleon momentum and the transverse one  $\vec{t}$  in the plane  $(\vec{p}, \vec{k})$  ( $x$  axis) and perpendicular to  $\vec{l}$  ( $y$  axis), then

$$P_\mu^{(l)} = \frac{1}{d_1} (q^2 p_{1\mu} - 2M^2 q_\mu), d_1^2 = M^2 q^2 (q^2 - 4M^2),$$

$$P_\mu^{(t)} = \frac{1}{d_2} [(q^2 - 4p_1 \cdot k_1) p_{1\mu} + 2(p_1 \cdot k_1 - M^2) q_\mu + (4M^2 - q^2) k_{1\mu}],$$

$$d_2^2 = (q^2 - 4M^2)(4p_1 \cdot k_1 p_1 \cdot k_2 - M^2 q^2),$$

$$P_\mu^{(n)} = \frac{1}{d_3} \langle \mu q k_1 p_1 \rangle, d_3^2 = \frac{q^2}{4} (4p_1 \cdot k_1 p_1 \cdot k_2 - M^2 q^2). \tag{16}$$

It can be verified that the set of the four-vectors  $P_\mu^{(l,t,n)}$  has the properties

$$P_\mu^{(\alpha)} P_\mu^{(\beta)} = -\delta_{\alpha\beta}, P_\mu^{(\alpha)} \cdot p_{1\mu} = 0, \alpha, \beta = l, t, n \tag{17}$$

and that in the reaction CMS we have

$$P_\mu^{(l)} = \frac{1}{M} (|\vec{p}|, E\vec{n}_1), P_\mu^{(t)} = (0, \vec{t}), P_\mu^{(n)} = (0, \vec{n}), \tag{18}$$

$$\vec{n}_1 = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}, \vec{n}_2 = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, \vec{t} = \frac{(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)\vec{n}_1 - \vec{n}_2}{\sqrt{1 - (\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)^2}}, \vec{n} = \frac{\vec{n}_2 \times \vec{n}_1}{\sqrt{1 - (\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)^2}}.$$

It is easy to show that the following relations are valid

$$P_\mu^{(l)} = s_{1\mu}^{(z)}, P_\mu^{(t)} = s_{1\mu}^{(x)}, P_\mu^{(n)} = s_{1\mu}^{(y)}. \quad (19)$$

Note that, unlike the elastic electron–nucleon scattering in the Born approximation, the hadronic tensor  $H_{\mu\nu}(1)$  in the time–like region contains the symmetric part even in the Born approximation due to the complexity of the nucleon form factors. So, this term leads to the non–zero polarization of the outgoing nucleon (the initial state is unpolarized) in the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N}$  reaction and it can be written as

$$P_y = \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{\tau} D} \text{Im} G_M G_E^*. \quad (20)$$

This expression gives the well known result for the polarization  $P_y$ , obtained in Ref. [28]. One can see also that:

- The polarization of the outgoing nucleon, in this case, is determined by the polarization component which is perpendicular to the reaction plane.
- The polarization, being T–odd quantity, does not vanish even in the one–photon–exchange approximation due to the complexity of the nucleon form factors in the time–like region (to say more exactly, due to the non–zero difference of the phases of these form factors). This is principal difference with the elastic electron–nucleon scattering.
- In the Born approximation this polarization becomes equal to zero at the scattering angle  $\theta = 90^\circ$  (as well as at  $\theta = 0^\circ$  and  $180^\circ$ ).

In the threshold region we can conclude that in the Born approximation this polarization must be zero due to the relation  $G_E = G_M$  which is valid at the threshold.

If one of the colliding beam is longitudinally polarized then nucleon acquires  $x$ – and  $z$ – components of the polarization, which lie in the  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$  reaction plane. These components can be written as (we assume 100% polarization of the electron beam)

$$P_x = -\frac{2\sin\theta}{\sqrt{\tau} D} \text{Re} G_M G_E^*, P_z = \frac{2}{D} \cos\theta |G_M|^2. \quad (21)$$

These polarization components are T–even observables and they are non–zero in the Born approximation even for the elastic electron–nucleon scattering. Note that in the Born approximation we obtain the result of Ref. [28]. The polarization component  $P_z$  equals to zero at the scattering angle  $\theta = 90^\circ$  in the Born approximation. Transversally polarized electron beam leads to the nucleon polarization which is smaller by factor  $(m/M)$  than for the case of the longitudinal polarization of the electron beam.

Let us consider the case when the produced antinucleon and nucleon are both polarized. The corresponding hadronic tensor can be written as

$$H_{\mu\nu}(2) = S_{\mu\nu}(s_1, s_2) + iA_{\mu\nu}(s_1, s_2),$$

$$A_{\mu\nu}(s_1, s_2) = [q \cdot s_1 (\tilde{s}_{2\mu} \tilde{p}_{1\nu} - \tilde{s}_{2\nu} \tilde{p}_{1\mu}) - q \cdot s_2 (\tilde{s}_{1\mu} \tilde{p}_{1\nu} - \tilde{s}_{1\nu} \tilde{p}_{1\mu})] \frac{\text{Im} G_E G_M^*}{\tau - 1},$$

$$S_{\mu\nu}(s_1, s_2) = A_g \tilde{g}_{\mu\nu} + A_1 \tilde{p}_{1\mu} \tilde{p}_{1\nu} + A_3 (\tilde{s}_{1\mu} \tilde{s}_{2\nu} + \tilde{s}_{1\nu} \tilde{s}_{2\mu}) + A_4 [q \cdot s_1 (\tilde{p}_{1\mu} \tilde{s}_{2\nu} + \tilde{p}_{1\nu} \tilde{s}_{2\mu}) - q \cdot s_2 (\tilde{p}_{1\mu} \tilde{s}_{1\nu} + \tilde{p}_{1\nu} \tilde{s}_{1\mu})], \quad (22)$$

$$\tilde{s}_{i\mu} = s_{i\mu} - \frac{q \cdot s_i}{q^2} q_\mu, \quad i = 1, 2,$$

where  $s_{2\mu}$  is the antinucleon polarization 4–vector ( $p_2 \cdot s_2 = 0$ ). Antisymmetric part of the tensor  $H_{\mu\nu}(2)$  arises due to the fact that nucleon form factors in the time–like region are complex quantities.

The structure functions  $A_i$  have the following form

$$\begin{aligned}
A_8 &= \frac{1}{2}(q^2 s_1 \cdot s_2 - 2q \cdot s_1 q \cdot s_2) |G_M|^2, \\
A_{11} &= 2 \frac{s_1 \cdot s_2}{\tau - 1} [\tau |G_M|^2 - |G_E|^2] + \frac{q \cdot s_1 q \cdot s_2}{M^2 (\tau - 1)^2} |G_E - G_M|^2, \\
A_s &= -\frac{q^2}{2} |G_M|^2, A_{1s} = \frac{1}{\tau - 1} \text{Re}(\tau G_M - G_E) G_M^*.
\end{aligned} \tag{23}$$

Using previous formulae one can obtain the following expressions for the components of the polarization correlation tensor  $P_{ik}$  ( $i, k = x, y, z$ ) of the nucleon and antinucleon, created by the one-photon-exchange mechanism in the  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$  process:

$$\begin{aligned}
P_{xx} &= \frac{\sin^2 \theta}{\tau D} [\tau |G_M|^2 + |G_E|^2], P_{yy} = \frac{\sin^2 \theta}{\tau D} [|G_E|^2 - \tau |G_M|^2], \\
P_{zz} &= \frac{1}{\tau D} [\tau(1 + \cos^2 \theta) |G_M|^2 - \sin^2 \theta |G_E|^2], \\
P_{xz} = P_{zx} &= -2 \frac{\sin \theta}{\sqrt{\tau D}} \cos \theta (\text{Re} G_M G_E^*), \tag{24}
\end{aligned}$$

where the first index of the tensor  $P_{ik}$  refers to the component of the nucleon polarization vector, whereas the second index refers to the component of the antinucleon polarization vector.

The antinucleon polarization four-vector,  $s_{2\mu}$ , is described by the formula (15) where it is necessary to do the following substitution:  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$  and  $\vec{\chi}_1 \rightarrow \vec{\chi}_2$  ( $\vec{\chi}_2$  is the polarization vector of the antinucleon in its rest frame). The antinucleon polarization 4-vectors  $\bar{P}_\mu^{(i)}$ ,  $i = l, t, n$  (in terms of the particles four-momenta) can be written down as

$$\begin{aligned}
\bar{P}_\mu^{(l)} &= -\frac{1}{d_1} (q^2 p_{2\mu} - 2M^2 q_\mu), \bar{P}_\mu^{(n)} = \frac{1}{d_3} \langle \mu q k_2 p_2 \rangle, \tag{25} \\
\bar{P}_\mu^{(t)} &= \frac{1}{d_2} [(q^2 - 4p_2 \cdot k_1) p_{2\mu} + 2(p_2 \cdot k_1 - M^2) q_\mu + (4M^2 - q^2) k_{1\mu}].
\end{aligned}$$

It is easy to show that the following relations are valid

$$\bar{P}_\mu^{(l)} = s_{2\mu}^{(z)}, \bar{P}_\mu^{(t)} = s_{2\mu}^{(x)}, \bar{P}_\mu^{(n)} = s_{2\mu}^{(y)}. \tag{26}$$

And for the completeness we give here the non-zero coefficients for the case of the longitudinally polarized electron beam

$$P_{xy} = P_{yx} = 0, P_{zy} = P_{yz} = \frac{\sin \theta}{\sqrt{\tau D}} \text{Im}(G_M G_E^*). \tag{27}$$

The following relation exists for these coefficients

$$P_{xx} + P_{yy} + P_{zz} = 1.$$

One can see that:

- The components of the tensor describing the polarization correlations  $P_{xx}$ ,  $P_{yy}$ ,  $P_{zz}$ ,  $P_{xz}$ , and  $P_{zx}$  are the T-even observables, whereas the components  $P_{yz}$ , and  $P_{zy}$  are the T-odd ones.
- In the Born approximation the expressions for the T-odd polarization correlations coincide with the corresponding components of the polarization correlation tensor of baryon  $B$  and antibaryon  $\bar{B}$  created by the one-photon-exchange

mechanism in the  $e^+ + e^- \rightarrow B + \bar{B}$  process [28]. The expressions for the T-even polarization correlations calculated in this paper have some misprints.

### HARD-PHOTON EMISSION

Let us consider the emission of the hard photon, i.e., consider the reaction (1). In this case the matrix element corresponding to the emission of photon by electron and positron, can be written as

$$M^\gamma = i4\pi\alpha\sqrt{4\pi\alpha}\frac{1}{q^2}j_\mu^\gamma J_\mu, \quad (28)$$

where the leptonic current with emission of additional photon has the form

$$j_\mu^\gamma = -\bar{v}(k_2)\left[\frac{1}{t_1}\gamma_\mu(\hat{k}_1 - \hat{k} + m)\hat{A} + \frac{1}{t_2}\hat{A}(\hat{k} - \hat{k}_2 + m)\gamma_\mu\right]u(k_1), \quad (29)$$

where  $t_1 = 2k \cdot k_1$ ,  $t_2 = 2k \cdot k_2$ ,  $A_\mu$  is the photon polarization four-vector and the square of the matrix element can be written as follows

$$|M^\gamma|^2 = 64\pi^3\alpha^3\frac{1}{q^4}L_{\mu\nu}^\gamma H_{\mu\nu}, L_{\mu\nu}^\gamma = j_\mu^\gamma j_\nu^{\gamma*}, \quad (30)$$

where the hadronic tensor has the same form as in the Born approximation but the structure functions defining this tensor depend on the shifted momentum transfer  $q = k_1 + k_2 - k$ .

Let us represent the leptonic tensor  $L_{\mu\nu}^\gamma$  as a sum of the spin-independent and spin-dependent part (we consider only the case of the longitudinally polarized electron beam)

$$L_{\mu\nu}^\gamma = L_{\mu\nu}^\gamma(0) + L_{\mu\nu}^\gamma(s_e), \quad (31)$$

where the spin-independent part of this tensor can be written as

$$L_{\mu\nu}^\gamma(0) = A_0\tilde{g}_{\mu\nu} + A_1\tilde{k}_{1\mu}\tilde{k}_{1\nu} + A_2\tilde{k}_{2\mu}\tilde{k}_{2\nu} + A_3(\tilde{k}_{1\mu}\tilde{k}_{2\nu} + \tilde{k}_{1\nu}\tilde{k}_{2\mu}), \quad (32)$$

where  $\tilde{k}_{i\mu} = k_{i\mu} - (q \cdot k_i / q^2)q_\mu$ , ( $i = 1, 2$ ) and the structure functions  $A_i$  are

$$A_0 = 2(2m^2q^2 - t_1t_2)\left(\frac{1}{t_1^2} + \frac{1}{t_2^2}\right) - 8k_1 \cdot k_2\frac{q^2}{t_1t_2}, A_1 = \frac{16m^2}{t_2^2} - \frac{8q^2}{t_1t_2},$$

$$A_2 = \frac{16m^2}{t_1^2} - \frac{8q^2}{t_1t_2}, A_3 = -\frac{16m^2}{t_1t_2}. \quad (33)$$

The spin-independent part of the leptonic tensor  $L_{\mu\nu}^\gamma(0)$  coincides with the one obtained in Ref. [34] and if we neglect the  $m^2 / t_1t_2$  term in the structure functions  $A_i$  then the result coincides with the expression obtained in Ref. [35].

Let us consider the spin-dependent part of the leptonic tensor  $L_{\mu\nu}^\gamma(s_e)$ . As it was noted above, we consider only the longitudinal polarization of the electron beam. The spin four-vector describing this polarization is  $s_{e\mu} = \lambda_e k_{1\mu} / m_e$  in calculations of polarization effects in the Born approximation (this gives sufficient accuracy when we neglect the electron mass in the Born approximation). But it is necessary to use more correct expression for the spin four-vector. We use the following form

$$s_{e\mu} = \frac{1}{N}[(s - 2m^2)k_{1\mu} - 2m^2k_{2\mu}], N^2 = m^2s(s - 4m^2), \quad (34)$$

where  $s = (k_1 + k_2)^2$  is the square of the total energy of the beams. One can see that this expression satisfies the

necessary conditions:  $s_e \cdot k_1 = 0$  and  $s_e^2 = -1$ . In the reaction (1) CMS this polarization four-vector can be written as  $s_{e\mu} = (E/m)(s_0, \vec{s})$ , where  $s_0 = p/E$ ,  $\vec{s} = \vec{p}/p$  and  $\vec{p}(E)$  is the electron momentum (energy). So, we see that this vector describes the longitudinal polarization of the electron.

Then the spin-dependent part of the leptonic tensor  $L'_{\mu\nu}(s_e)$  can be written as

$$L'_{\mu\nu}(s_e) = 2 \frac{i}{s} (1 - 4 \frac{m^2}{s})^{-1/2} \{B_1 < \mu\nu k_1 q > + B_2 < \mu\nu k_2 q >\}, \quad (35)$$

where the structure functions  $B_i$  are

$$B_1 = -2 \frac{s}{t_2} (1 - \frac{s}{t_1}) + 4m^2 (\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2}) [1 - s(\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2})] + 8m^4 (\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2})^2, \\ B_2 = 2 \frac{s}{t_1} \left(1 - \frac{s}{t_2}\right) - 8m^2 \frac{q \cdot k}{t_1^2} + 8m^4 \left(\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2}\right)^2. \quad (36)$$

Let us consider the case of unpolarized initial beams and when final state is unpolarized or the final nucleon has polarization. Then the contraction of the spin-independent leptonic tensor and hadronic tensor which corresponds to the polarized nucleon can be written as

$$S^\gamma = L'_{\mu\nu}(0) H_{\mu\nu} = L'_{\mu\nu}(0) [H_{\mu\nu}(0) + H_{\mu\nu}(1)] = S^\gamma(0) + S^\gamma(1), \quad (37)$$

where  $S^\gamma(0)$  ( $S^\gamma(1)$ ) corresponds to the unpolarized particles (polarized nucleon).

We can write for the unpolarized part

$$S^\gamma(0) = L'_{\mu\nu}(0) H_{\mu\nu}(0) = L'_{\mu\nu}(0) [\bar{H}_1 \tilde{g}_{\mu\nu} + \frac{\bar{H}_2}{M^2} \tilde{p}_{1\mu} \tilde{p}_{1\nu}] = \bar{H}_1 Q_1 + \frac{\bar{H}_2}{M^2} Q_2, \quad (38)$$

where the bar over the structure functions  $H_i, i=1,2$  means that they depend on the shifted variable  $q^2$  which is equal to  $q^2 = s - t_1 - t_2$ . In the reaction (1) CMS it is  $q^2 = 4E(E - \omega)$ , where  $\omega$  is the hard photon energy. The kinematic coefficients  $Q_{1,2}$  can be written as

$$Q_1 = -8 + \frac{4}{t_1 t_2} (s^2 + q^4 + 4m^2 s) - 8m^2 (q^2 + 2m^2) \left(\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2}\right)^2, \quad (39) \\ Q_2 = 2q^2 \left(\frac{\chi_1}{t_2} + \frac{\chi_2}{t_1} + \frac{1}{t_1 t_2} [\chi_1^2 + \chi_2^2 - s(\chi_1 + \chi_2)]\right) + 4m^2 \frac{q^4}{t_1 t_2} + \\ + 4m^2 \left(\frac{\chi_1}{t_2} - \frac{\chi_2}{t_1}\right) \left(\frac{q^2 - \chi_1}{t_2} - \frac{q^2 - \chi_2}{t_1}\right) + 2M^2 \left[2 \frac{q^2 s}{t_1 t_2} + \frac{t_1}{t_2} + \frac{t_2}{t_1} - 2m^2 q^2 \left(\frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2}\right)^2\right],$$

where  $\chi_{1,2} = 2p_1 \cdot k_{1,2}$ .

The contraction of the unpolarized lepton tensor and the hadron tensor corresponding to the polarized nucleon has the form

$$S^\gamma(1) = L'_{\mu\nu}(0) H_{\mu\nu}(1) = \frac{2}{M} (1 - \tau)^{-1} \text{Im} G_M(q^2) G_E^*(q^2) Q_3, \quad (40)$$

where the function  $Q_3$  can be written as

$$Q_3 = -4y_1 \left[ \frac{q^2}{t_1 t_2} (2\chi_1 + t_1 - s) + 2m^2 \left( \frac{2\chi_2 - q^2}{t_1 t_2} - \frac{2\chi_1 - q^2}{t_2^2} \right) \right] - 4y_2 \left[ \frac{q^2}{t_1 t_2} (2\chi_2 + t_2 - s) + 2m^2 \left( \frac{2\chi_1 - q^2}{t_1 t_2} - \frac{2\chi_2 - q^2}{t_1^2} \right) \right], \quad (41)$$

$$y_1 = \langle k_1 p_1 p_2 s \rangle, y_2 = \langle k_2 p_1 p_2 s \rangle.$$

Let us choose in the reaction CMS the following coordinate system:  $z$  axis is directed along the nucleon momentum  $\vec{p}_1$ , the momentum of the initial electron beam  $\vec{k}_1$  forms the  $xz$  plane (the angle between these two momenta is  $\vartheta$ ),  $y$  axis is directed along the vector  $\vec{k}_1 \times \vec{p}_1$ . The momentum of the emitted photon  $\vec{k}$  is defined by the polar and azimuthal angles,  $\vartheta_\gamma$  and  $\phi_\gamma$ , respectively. The angles defining the kinematics of the reaction (1) in its CMS are given in Fig.1.

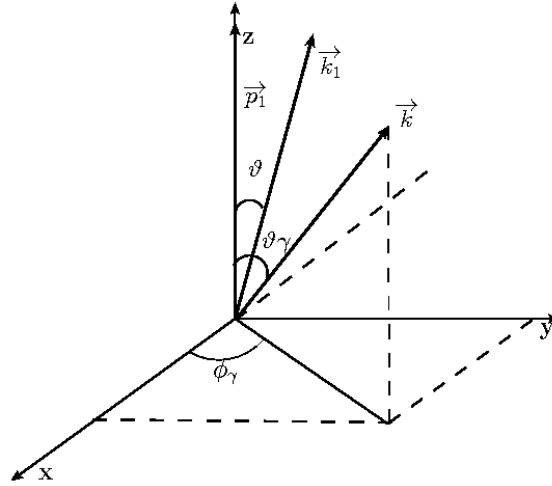


Fig. 1. The angles defining the kinematics of the reaction (1) in its CMS.

Then the cross section of the process (1) can be written as

$$d\sigma^\gamma = \frac{1}{32\pi^3} \frac{\alpha^3}{sq^4} L_{\mu\nu}^\gamma H_{\mu\nu} \frac{d^3 \vec{k}}{\omega} \frac{d^3 \vec{p}_1}{E_1} \frac{d^3 \vec{p}_2}{E_2} \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p_1 - p_2 - k), \quad (42)$$

where  $E_1(E_2)$  and  $\omega$  are the energies of the nucleon (antinucleon) and photon, respectively;  $\vec{p}_2$  is the antinucleon momentum.

On the basis of this expression we can obtain the different distributions depending on the experimental conditions. If we measure the nucleon scattering angle and variables of the emitted photon, we can obtain the following distribution

$$\frac{d\sigma^\gamma}{d\Omega d\Omega_\gamma d\omega} = \frac{1}{32\pi^3} \frac{\alpha^3}{sq^4} \omega |\vec{p}_1| \left[ W - \omega + \omega \frac{E_1}{|\vec{p}_1|} \cos \vartheta_\gamma \right]^{-1} S^\gamma. \quad (43)$$

The dependence of this expression on the azimuthal angle  $\phi_\gamma$  is due to the denominators  $t_1$  and  $t_2$ . The integration over this variable can be done easily. In this case the quantity  $q^2$  is  $q^2 = W(W - 2\omega)$ . Using the energy and momentum conservation:  $W = \omega + E_1 + E_2$  and  $\vec{k} + \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$ , we can obtain the following relation between the nucleon energy  $E_1$  and the photon polar angle  $\vartheta_\gamma$

$$W(W - 2\omega) - 2(W - \omega)E_1 = 2\omega |\vec{p}_1| \cos \vartheta_\gamma. \quad (44)$$

If we retain the energies of the final hadrons we can obtain another distribution, namely

$$\frac{d\sigma^\gamma}{d\Omega dE_1 dE_2 d\phi_\gamma} = \frac{1}{32\pi^3} \frac{\alpha^3}{sq^4} S^\gamma. \quad (45)$$

In this case  $q^2 = W[2(E_1 + E_2) - W]$ . The integration over the photon azimuthal angle  $\phi_\gamma$  can be done easily. Instead of

antinucleon energy  $E_2$  we can introduce the acollinearity angle  $\chi$  (the angle between the momenta of the nucleon and antinucleon) which is measured in some experiments. From the energy and momentum conservation we have

$$2|\vec{p}_1||\vec{p}_2|\cos\chi = W^2 + 2M^2 - 2W(E_1 + E_2) + 2E_1E_2. \quad (46)$$

If the additional photon is absent then  $\chi = 180^\circ$  and the deviation of this angle from the value  $180^\circ$  means that there is an additional photon. Experimenters choose the events in some interval of this angle. Using the above expression we can change  $dE_2$  by  $d\cos\chi$ . We have

$$d\cos\chi = -\frac{dE_2}{2|\vec{p}_1||\vec{p}_2|^3}[2M^2(E_1 - W) + E_2(W^2 - 2WE_1 + 2M^2)]. \quad (47)$$

The energy of the antinucleon  $E_2$  can be expressed in terms of the nucleon energy  $E_1$  and the acollinearity angle  $\chi$  by the following way

$$E_2 = \frac{(W - E_1)(W^2 - 2WE_1 + 2M^2) \pm |\vec{p}_1|\cos\chi\sqrt{W^2(W - 2E_1)^2 - 4M^2|\vec{p}_1|^2\sin^2\chi}}{2[(W - E_1)^2 - |\vec{p}_1|^2\cos^2\chi]}. \quad (48)$$

The polar angle of the emitted photon  $\mathcal{G}_y$  can be also expressed in terms of the energies of the final hadrons. We have

$$\cos\mathcal{G}_y = \frac{(W - E_1)(E_1 + 2E_2 - W) - E_1^2}{2|\vec{p}_1|(W - E_1 - E_2)}. \quad (49)$$

Let us parameterize the nucleon spin four-vector  $s_{1\mu}$  in terms of the four-momenta of the particles participating in the reaction under study. When measuring the polarization of the produced particle the  $z$ -axis is usually chosen along the momentum of this particle. So, in the reaction CMS we choose the longitudinal direction  $\vec{l}$  ( $z$  axis) along the nucleon momentum and the transverse one  $\vec{t}$  in the plane  $(\vec{p}_1, \vec{k}_1)$  and perpendicular to  $\vec{l}$ , and denote these polarization four-vectors as  $P_\mu^{(i)}, i = l, t, n$

$$\begin{aligned} P_\mu^{(l)} &= \frac{1}{d_l}[(\chi_1 + \chi_2)p_{1\mu} - 2M^2(k_1 + k_2)_\mu], d_l^2 = M^2[(\chi_1 + \chi_2)^2 - 4M^2s], \\ P_\mu^{(t)} &= \frac{1}{d_t}\{(\chi_1 + \chi_2)(\chi_2 k_{1\mu} - \chi_1 k_{2\mu}) + s[(\chi_1 - \chi_2)p_{1\mu} - 2M^2(k_1 - k_2)_\mu]\}, \\ d_t^2 &= s(\chi_1\chi_2 - M^2s)[(\chi_1 + \chi_2)^2 - 4M^2s], \\ P_\mu^{(n)} &= -\frac{1}{d_n}\langle \mu k_1 k_2 p_1 \rangle, d_n^2 = \frac{s}{4}(\chi_1\chi_2 - M^2s). \end{aligned} \quad (50)$$

It can be verified that the set of the four-vectors  $P_\mu^{(l,t,n)}$  has the properties

$$P_\mu^{(\alpha)}P_\mu^{(\beta)} = -\delta_{\alpha\beta}, P_\mu^{(\alpha)} \cdot p_{1\mu} = 0, \alpha, \beta = l, t, n \quad (51)$$

and that in the reaction CMS we have

$$P_\mu^{(l)} = \frac{1}{M}(|\vec{p}_1|, E_1\vec{n}_1), P_\mu^{(t)} = (0, \vec{t}), P_\mu^{(n)} = (0, \vec{n}), \quad (52)$$

$$\vec{n}_1 = \frac{\vec{p}_1}{|\vec{p}_1|}, \vec{n}_2 = \frac{\vec{k}_1}{|\vec{k}_1|}, \vec{t} = \frac{\vec{n}_2 - (\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)\vec{n}_1}{\sqrt{1 - (\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)^2}}, \vec{n} = \frac{\vec{n}_2 \times \vec{n}_1}{\sqrt{1 - (\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)^2}}.$$



Note that in the Born case (there is no additional photon) these nucleon polarization 4-vectors coincides with the ones given by the Eq. (16).

The variables  $y_{1,2}$  in Eq. (41) have the following expressions for particular choice of the nucleon polarization four-vectors  $P_\mu^{(i)}$ ,  $i = l, t, n$

$$y_2' = -y_1' = 2 \frac{M^2}{d_i} \langle k_1 k_2 p_1 p_2 \rangle, \quad y_i' = \frac{\langle k_1 k_2 p_1 p_2 \rangle}{d_i} [2M^2 s - \chi_i (\chi_1 + \chi_2)], \quad i = 1, 2,$$

$$y_1^n = \frac{1}{8d_n} \{s[s\chi_1 - 2M^2(s-t_1)] + \chi_1[\chi_2(s-t_1) - \chi_1(s-t_2)]\}, \quad (53)$$

$$y_2^n = -\frac{1}{8d_n} \{s[s\chi_2 - 2M^2(s-t_2)] + \chi_2[\chi_1(s-t_2) - \chi_2(s-t_1)]\}.$$

The function  $Q_3$  depends on the nucleon polarization four-vectors  $P_\mu^{(i)}$ ,  $i = l, t, n$  and it determines the spin-dependent part of the cross section. The function  $Q_3$  has the following expressions for a particular choice of the nucleon polarization four-vectors  $P_\mu^{(l,t,n)}$  (in the reaction CMS)

$$Q_3^{(l)} = 4Ms\omega \sin\vartheta \sin\vartheta_\gamma \sin\phi_\gamma [(E-\omega) \left( \frac{1}{t_1} - \frac{1}{t_2} + 4W |\vec{p}_1| \cos\vartheta \frac{1}{t_1 t_2} \right) -$$

$$-2m^2 |\vec{p}_1| \cos\vartheta \left( \frac{1}{t_1^2} + \frac{1}{t_2^2} \right) - 2m^2 (E_1 - E + \omega) \left( \frac{1}{t_1^2} - \frac{1}{t_2^2} \right)],$$

$$Q_3^{(t)} = 4s\omega \sin\vartheta_\gamma \sin\phi_\gamma \{ (E-\omega) [(p_1 - E_1 \cos\vartheta) \frac{1}{t_1} + (p_1 + E_1 \cos\vartheta) \frac{1}{t_2}] -$$

$$-8 \frac{E}{t_1 t_2} p_1 (E-\omega) (E_1 \cos^2\vartheta + E - E_2) + 2 \frac{m^2}{t_1^2} (p_1 + E_1 \cos\vartheta) (p_1 \cos\vartheta + E - E_2) + 2 \frac{m^2}{t_2^2} (p_1 - E_1 \cos\vartheta) (E - E_2 - p_1 \cos\vartheta)\},$$

$$Q_3^{(n)} = 4 \frac{E}{p_1} \frac{1}{\sin\vartheta} [L_0 + L_+ \left( \frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_2} \right) + L_- \left( \frac{1}{t_1} - \frac{1}{t_2} \right) + 2 \frac{L_{12}}{t_1 t_2} + 2 \bar{L}_+ \left( \frac{1}{t_1^2} + \frac{1}{t_2^2} \right) + 2 \bar{L}_- \left( \frac{1}{t_1^2} - \frac{1}{t_2^2} \right)],$$

where for the coefficients  $L_i$  we have

$$L_0 = -4E_1 p_1 (E-\omega) \cos\vartheta, \quad L_{12} = 2sq^2 p_1 \cos\vartheta [E^2 + E_1(2E_1 - 3E) - p_1^2 \sin^2\vartheta],$$

$$L_+ = 2q^2 p_1 \cos\vartheta [E_1(5E - 2E_1) - E(E + E_2) + p_1^2 \sin^2\vartheta],$$

$$L_- = q^2 [2EE_1(\omega - E) + E_1^2(E_1 - E_2) + 2M^2 E_2 + p_1^2(2E_1 + 2E - \omega) \cos^2\vartheta],$$

$$\bar{L}_+ = -4m^2 E p_1 \cos\vartheta [2E(E - E_2)(E + E_1 - E_2) - M^2 \omega - (2E - \omega) p_1^2 \sin^2\vartheta],$$

$$\bar{L}_- = -4m^2 E (E - E_2) [2EE_1(E + E_1 - E_2) - M^2(2E + \omega) - (4E - \omega) p_1^2 \sin^2\vartheta].$$

Let us integrate the expressions  $Q_3^{(i)}$ ,  $i = l, t, n$ , over the angular variable  $\phi_\gamma$ . We have the following integrals

$$I_{1,2} = \int \sin\phi_\gamma \frac{d\phi_\gamma}{t_{1,2}}, \quad J_{1,2} = \int \sin\phi_\gamma \frac{d\phi_\gamma}{t_{1,2}^2}, \quad I_{12} = \int \sin\phi_\gamma \frac{d\phi_\gamma}{t_1 t_2}, \quad (55)$$

where

$$t_{1,2} = A_{1,2} + B_{1,2} \cos \phi_\gamma, A_{1,2} = 2\omega(E \mp k_1 \cos \vartheta \cos \vartheta_\gamma), B_{1,2} = \pm 2\omega k_1 \sin \vartheta \sin \vartheta_\gamma.$$

After integration we have

$$I_i = -\frac{1}{B_i} \ln(A_i + B_i \cos \phi_\gamma), \quad J_i = \frac{1}{B_i} \frac{1}{A_i + B_i \cos \phi_\gamma}, \quad i = 1, 2,$$

$$I_{12} = \frac{1}{2E\omega B_1} \ln \left| \frac{A_2 + B_2 \cos \phi_\gamma}{A_1 + B_1 \cos \phi_\gamma} \right|. \quad (56)$$

If we integrate over the whole possible region of the angle  $\phi_\gamma$ , i.e., over  $(0, 2\pi)$ , we have that all these integrals are equal to zero. So, in this case only perpendicular (to the reaction plane) polarization of the nucleon gives nonzero contribution (as well as in the Born approximation). We have the following integrals

$$\int \frac{d\phi_\gamma}{t_1} = \frac{\pi}{\Delta_-}, \int \frac{d\phi_\gamma}{t_2} = \frac{\pi}{\Delta_+}, \Delta_\mp = \omega k_1 \left[ \left( \frac{E}{k_1} \cos \vartheta \mp \cos \vartheta_\gamma \right)^2 + \frac{m^2}{k_1^2} \sin^2 \vartheta \right]^{1/2},$$

$$\int \frac{d\phi_\gamma}{t_1^2} = \frac{\pi}{4\Delta_-^3} A_1, \int \frac{d\phi_\gamma}{t_2^2} = \frac{\pi}{4\Delta_+^3} A_2, \int \frac{d\phi_\gamma}{t_1 t_2} = \frac{\pi}{2k \cdot q} \left( \frac{1}{\Delta_-} + \frac{1}{\Delta_+} \right). \quad (57)$$

So, we have after integration over the angle  $\phi_\gamma$

$$Q^{(n)} = \int Q_3^{(n)} d\phi_\gamma = \frac{E}{p_1} \frac{4\pi}{\sin \vartheta} \left[ 2L_0 + L_+ \left( \frac{1}{\Delta_-} + \frac{1}{\Delta_+} \right) + L_- \left( \frac{1}{\Delta_-} - \frac{1}{\Delta_+} \right) + \frac{L_{12}}{k \cdot q} \left( \frac{1}{\Delta_-} + \frac{1}{\Delta_+} \right) + \frac{1}{2} \bar{L}_+ \left( \frac{A_1}{\Delta_-^3} + \frac{A_2}{\Delta_+^3} \right) + \frac{1}{2} \bar{L}_- \left( \frac{A_1}{\Delta_-^3} - \frac{A_2}{\Delta_+^3} \right) \right]. \quad (58)$$

### RADIATIVE RETURN. SMALL ANGLES

Since the main contribution, proportional to the large logarithm, comes from the integration of the integrand in the case of collinear kinematics of photon emission, we consider this case. For definiteness let us consider the case when the emitted photon moves close to the initial electron direction:

$$\widehat{\vec{k}_1} \cdot \widehat{\vec{k}} = \vartheta \leq \vartheta_0 \ll 1, \vartheta_0 \gg \frac{m}{E}.$$

The differential cross section can be written as

$$\frac{d\sigma^\gamma}{d\Omega dx d\Omega_\gamma} = \frac{1}{32\pi^2} \frac{\alpha^3}{(1-x)^2 s^2} x y_1 [2-x+x\cos\vartheta \frac{Y_1}{y_1}]^{-1} L_{\mu\nu}^\gamma H_{\mu\nu}, \quad (59)$$

where  $x$  is the energy fraction carried away by the emitted photon,  $x = \omega / E$  and  $y_1 = p_1 / E$ ,  $Y_1 = E_1 / E$  (here  $p_1(E_1)$  is the momentum (energy) of the nucleon in the reaction CMS).

Integrating the leptonic tensor over the photon angular variables we obtain the following result for the case of unpolarized initial beams

$$L_{\mu\nu}^{\gamma(u\bar{m})} = \int L_{\mu\nu}^\gamma(0) d\Omega_\gamma = -\frac{16\pi^2}{x\alpha E^2} F(L, x) [E^2 \tilde{g}_{\mu\nu} + (1-x) \tilde{k}_{1\mu} \tilde{k}_{1\nu}], \quad (60)$$

where the factor  $F(L, x)$  has the form [36]

$$F(L, x) = \frac{\alpha}{2\pi} [(L_s - 1) \frac{1+(1-x)^2}{x} + x + \frac{1+(1-x)^2}{x} L_\theta], L_s = \ln \frac{s}{m^2}, L_\theta = \ln \frac{g_0^2}{4}. \quad (61)$$

After the integration over the photon variables the differential cross section can be written as

$$\frac{d\sigma^\gamma}{d\Omega dx} = \frac{\alpha^2}{s^3} \frac{y_1}{(1-x)^2} F(L, x) [2-x + x \cos \vartheta \frac{Y_1}{y_1}]^{-1} S^{um}, \quad (62)$$

where we introduce

$$S^{um} = -[E^2 \tilde{g}_{\mu\nu} + (1-x) \tilde{k}_{1\mu} \tilde{k}_{1\nu}] H_{\mu\nu}.$$

Then the differential cross section for the case of the unpolarized particles can be written as

$$\frac{d\sigma_{un}^\gamma}{d\Omega dx} = \frac{\alpha^2}{2s} \frac{y_1}{(1-x)^2} F(L, x) [2-x + x \cos \vartheta \frac{Y_1}{y_1}]^{-1} D(x), \quad (63)$$

where the factor  $D(x)$  is

$$D(x) = -\frac{1}{4} \frac{y^2}{1-x} \frac{1}{x+y^2-1} \{ [4(1-x)(1-Y_1)(Y_1+x-1) - y_1^2(2-x)^2 \sin^2 \vartheta - x^2 y^2] (\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2) - 8(1-\tau)(1-x)^2 |G_M(q^2)|^2 \}, \quad (64)$$

where  $y = M/E$  and  $q^2 = (1-x)s$ ,  $\tau = q^2/4M^2$ . The nucleon electromagnetic form factors  $G_M$  and  $G_E$  are taken at the value  $q^2$ . Thus, the emission of the photon decreases the argument of the form factors. If we remove the emission factor  $F(L, x)dx$  and put  $x=0$  we obtain the standard expression for the differential cross section in the Born approximation since  $D(0) = D$ . Setting the form factors equal to one,  $G_E = G_M = 1$ , we obtain the differential cross section for the case of the point particles in the final state, for example,  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$  or  $\tau^+\tau^-$ . To do this, it is necessary to replace  $D(x)$  by  $D^{point}(x)$  where

$$D^{point}(x) = \frac{1}{4} \frac{1}{1-x} \{ 4(1-x)[(1-x)(1+Y_1) + Y_1(1-Y_1)] - y_1^2(2-x)^2 \sin^2 \vartheta - x^2 y^2 \}. \quad (65)$$

The nucleon energy  $E_1$ , the scattering angle  $\vartheta$  and  $x$  variable are connected by the following relation

$$xy_1 \cos \vartheta = 2(1-x) - (2-x)Y_1.$$

Using this relation we can determine the nucleon energy as a function of two variables:  $x$  and  $\cos \vartheta$ . We have

$$Y_1 = [(2-x)^2 - x^2 \cos^2 \vartheta]^{-1} \{ 2(1-x)(2-x) \pm x \cos \vartheta [4(1-x)^2 - y^2((2-x)^2 - x^2 \cos^2 \vartheta)]^{1/2} \}. \quad (66)$$

When calculating the radiative corrections to the polarization observables it is convenient to parameterize the nucleon polarization 4-vector in terms of the four-momenta of the particles participating in the reaction under study. Any four-vector  $U_\mu^{(i)}$  which parameterize the polarization state of the particle can be read as

$$U_\rho^{(i)} = U_\rho^{(i)}(k_1, k_2, p_1, p_2). \quad (67)$$

Let us imagine for a moment that chosen parametrization on the right side of Eq. (67) is stabilized relative substitution  $k_1 \rightarrow xk_1$

$$U_\mu^{(i)}(k_1, k_2, p_1, p_2) = U_\mu^{(i)}(xk_1, k_2, p_1, p_2). \quad (68)$$

Further we call such parametrization a stable one (relative to the substitution  $k_1 \rightarrow xk_1$ ) and denote such set of polarization four-vectors as  $S_\mu^{(i)}, i = l, t, n$ .

In what follows we use the following set of the stable polarization four-vectors

$$S_\mu^{(l)} = \frac{1}{M\chi_1}(2M^2k_{1\mu} - \chi_1p_{1\mu}), \quad S_\mu^{(n)} = \frac{1}{n_1} \langle \mu k_2 k_1 p_1 \rangle, \quad n_1^2 = \frac{s}{4}(\chi_1\chi_2 - M^2s), \quad (69)$$

$$S_\mu^{(t)} = \frac{1}{n_2}[\chi_1k_{2\mu} - sp_{1\mu} - (\chi_2 - 2M^2\frac{s}{\chi_1})k_{1\mu}], \quad n_2^2 = s(\chi_1\chi_2 - M^2s).$$

If the polarization four-vectors  $U_\mu^{(i)}$  are unstable ones under above substitution they can be always expressed in terms of the stable polarization four-vectors by means of some linear combination

$$U_\mu^{(i)}(k_1, k_2, p_1, p_2) = A_{ij}(k_1, k_2, p_1, p_2)U_\mu^{(j)}(k_1, k_2, p_1, p_2). \quad (70)$$

In case of the radiative return at small angles we have only one plane (reaction plane) and, therefore, normal polarization four-vector  $S_\mu^{(n)}$  do not mix with the polarization four-vectors  $P_\mu^{(l,t)}$ . In this case we have some rotation in the reaction plane and it can be written down as

$$S_\mu^{(l)} = \cos\psi P_\mu^{(l)} + \sin\psi P_\mu^{(t)}, \quad S_\mu^{(t)} = \cos\psi P_\mu^{(t)} - \sin\psi P_\mu^{(l)}, \quad (71)$$

where

$$\cos\psi = \frac{E_1\cos\theta - p_1}{E_1 - p_1\cos\theta}, \quad \sin\psi = -\frac{M\sin\theta}{E_1 - p_1\cos\theta}. \quad (72)$$

Since in the time-like region the nucleon form factors are complex functions, the  $H_{\mu\nu}(1)$  tensor has a symmetric part (in  $\mu, \nu$  indices) and, therefore, the contraction of the  $L_{\mu\nu}^{y(un)}$  and  $H_{\mu\nu}(1)$  tensors is not zero. This leads to the nucleon polarization in the case when the rest of the particles are unpolarized. The polarization vector in this case is normal to the reaction plane and can be written as

$$D(x)P_y = 2yy_1 \frac{\sin\theta}{x+y^2-1} (Y_1 - 1 + x + y_1\cos\theta) \text{Im}G_E(q^2)G_M^*(q^2). \quad (73)$$

Putting  $x = 0$  we obtain the result of the Born approximation. For the point final particles we have natural result that the polarization is equal to zero.

Let us consider the case when the electron beam is longitudinally polarized. Integrating the leptonic tensor  $L_{\mu\nu}^\gamma(s_e)$  over the photon angular variables we obtain the following result [36]

$$L_{\mu\nu}^{\gamma(pol)} = \int L_{\mu\nu}^\gamma(s_e) d\Omega_\gamma = i \frac{8\pi^2}{x\alpha E^2} F^{pol}(L, x) \langle \mu\nu k_1 k_2 \rangle, \quad (74)$$

where the factor  $F^{pol}(L, x)$ , describing the photon emission by the longitudinally polarized electron beam, has the form

$$F^{pol}(L, x) = \frac{\alpha}{2\pi} [(L_s - 1) \frac{1+(1-x)^2}{x} - x + \frac{1+(1-x)^2}{x} L_\theta]. \quad (75)$$

The contraction of the tensors  $L_{\mu\nu}^{\gamma(pol)}$  and  $H_{\mu\nu}(0)$  is equal to zero and, therefore, the asymmetry determined by the longitudinal polarization of the electron beam is absent. A non-zero asymmetry may arise due to the two-photon exchange contribution, for example. The contraction of the  $L_{\mu\nu}^{\gamma(pol)}$  and antisymmetrical part (in  $\mu, \nu$  indices) of the  $H_{\mu\nu}(1)$  tensors is non zero. This leads to the nucleon polarization and in this case the polarization vector lies in the

reaction plane. The components of the nucleon polarization vector for the case of the stable set of the polarization four-vectors can be written down as (we assume 100% polarization of the electron beam)

$$F(L, x)D(x)P_x = 2\sin\vartheta \frac{F^{pol}(L, x)}{Y_1 - y_1 \cos\vartheta} \frac{yy_1}{x + y^2 - 1} \{(1-x)(1-Y_1 + y_1 \cos\vartheta) |G_M(q^2)|^2 - \quad (76)$$

$$- [y^2 + (1-x)(y_1 \cos\vartheta - Y_1)] \operatorname{Re} G_E(q^2) G_M^*(q^2)\},$$

$$F(L, x)D(x)P_z = -\frac{1}{2} \frac{F^{pol}(L, x)}{Y_1 - y_1 \cos\vartheta} \frac{1}{x + y^2 - 1} \{(1-x)(1-Y_1 + y_1 \cos\vartheta)[y^2 + (1-x)(y_1 \cos\vartheta - \quad (77)$$

$$-Y_1)] |G_M(q^2)|^2 + y^2[(1-x)(Y_1 - y_1 \cos\vartheta)(2 - Y_1 + y_1 \cos\vartheta) - y^2] \operatorname{Re} G_E(q^2) G_M^*(q^2)\}.$$

If we remove the unpolarized and polarized emission factors  $F(L, x)dx$  and  $F^{pol}(L, x)dx$  and put  $x=0$  we obtain the standard expressions for the components of the nucleon polarization vector in the Born approximation. For the case of the point final particles we have

$$F(L, x)D(x)P_x^{point} = -y(2-x)\sin\vartheta F^{pol}(L, x), \quad (78)$$

$$F(L, x)D(x)P_z^{point} = [xy_1 + (2-x)Y_1 \cos\vartheta] F^{pol}(L, x).$$

Let us consider the case when the produced antinucleon and nucleon are both polarized. Then the components of the polarization correlation tensor  $P_{ik}$ , ( $i, k = x, y, z$ ), of the nucleon and antinucleon (determined as a coefficient in front of  $\xi_{1i}, \xi_{2k}$  where  $\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$ ) is the nucleon (antinucleon) polarization vector in its rest frame) can be written as

$$D(x)P_{yy} = \frac{z}{1-x-y^2} [(1-x) |G_M(q^2)|^2 - y^2 |G_E(q^2)|^2], \quad (79)$$

$$D(x)P_{xx} = (2-2x+x^2)\sin^2\vartheta |G_M(q^2)|^2 + z(1+dx^2\sin^2\vartheta) \frac{1}{\tau-1} (\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2) -$$

$$-d\sin^2\vartheta \{x[4(1-x) + (2-x)(xy - 2Y_1) - 2y_1 \cos\vartheta] |G_M(q^2)|^2 - \frac{x}{\tau-1} [-4(1-x)^2 + 2(1-x)(y+Y_1) +$$

$$+xy(Y_1 - y)](\tau |G_M(q^2)|^2 - \operatorname{Re} G_E(q^2) G_M^*(q^2)) + \frac{x^2}{2y^2} \frac{z}{(\tau-1)^2} [y(y-Y_1) - 2(1-x)] |G_E(q^2) - G_M(q^2)|^2\},$$

$$D(x)P_{zz} = \frac{1}{y^2} \{2yY_1 \cos^2\vartheta - 2y_1(y_1 + x \cos\vartheta) + x(2-x)[y(y_1 - Y_1 \cos\vartheta) \cos\vartheta + (y_1 + x \cos\vartheta)(y_1 -$$

$$-Y_1 \cos\vartheta)\} |G_M(q^2)|^2 + \frac{z}{y^2} \frac{1}{\tau-1} \{y_1(y_1 + x \cos\vartheta) + yY_1[1 + d(y_1 + x \cos\vartheta)^2]\} (\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2) -$$

$$-\frac{1}{y^2} \frac{1}{\tau-1} \{x(2-x)[yy_1 - Y_1(y_1 + x \cos\vartheta)] \cos\vartheta - y_1(y_1 + x \cos\vartheta)(2-x)^2 + x^2 y Y_1 \cos^2\vartheta\}$$

$$[\tau |G_M(q^2)|^2 - \operatorname{Re} G_E(q^2) G_M^*(q^2)] + \frac{1}{2y^2} \frac{z}{\tau-1} |G_E(q^2) - G_M(q^2)|^2 +$$

$$+\frac{d}{y} (y_1 + x \cos\vartheta)(y_1 \cos\vartheta + x) \{2Y_1 \cos\vartheta + x(2-x)(y_1 - Y_1 \cos\vartheta)\} |G_M(q^2)|^2 -$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{x}{2y^2} \frac{z}{(\tau-1)^2} [(2-x)y_1 + xY_1 \cos \vartheta] |G_E(q^2) - G_M(q^2)|^2 - \\
& -\frac{1}{(\tau-1)} [(2-x^2)y_1 + x^2Y_1 \cos \vartheta - 2(1-x)y_1(Y_1 - y_1 \cos \vartheta)] (\tau |G_M(q^2)|^2 - \text{Re}G_E(q^2)G_M^*(q^2)) - \\
& -\frac{2}{y^2} \frac{1}{(\tau-1)} (1-x)(1-Y_1 + y_1 \cos \vartheta) \cos \vartheta [y_1 y_1 + Y_1(y_1 + x \cos \vartheta)] (\tau |G_M(q^2)|^2 - \text{Re}G_E(q^2)G_M^*(q^2)), \\
D(x)P_{xz} = & -\sin \vartheta \{ (2-2x+x^2) \cos \vartheta |G_M(q^2)|^2 + \frac{1}{y} (y_1 + x \cos \vartheta) [-x(2-x) + yd(y_1 \cos \vartheta + x)(2- \\
& -2x+x^2)] |G_M(q^2)|^2 + \frac{1}{y} \frac{1}{(\tau-1)} (y_1 + x \cos \vartheta) [xyzd(\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2) - \\
& -2(1-x)(1+y_1 \cos \vartheta - Y_1)(\tau |G_M(q^2)|^2 - \text{Re}G_E(q^2)G_M^*(q^2))] - \frac{x}{y} \frac{1}{(\tau-1)} \sin \vartheta \{ (y_1 + x \cos \vartheta) [2-x - \\
& -xyd(y_1 \cos \vartheta + x)] - xycos \vartheta \} \left[ \frac{z}{2y^2} \frac{1}{(\tau-1)} |G_E(q^2) - G_M(q^2)|^2 + \tau |G_M(q^2)|^2 - \text{Re}G_E(q^2)G_M^*(q^2) \right], \\
D(x)P_{zx} = & -\frac{\sin \vartheta}{y} \{ (2-2x+x^2)Y_1 \cos \vartheta + xd[2(1-x)y_1(y - \sin^2 \vartheta Y_1) + y(2-x)(yy_1 - y_1Y_1 - \\
& -xY_1 \cos \vartheta)] |G_M(q^2)|^2 - \frac{x}{y} zd \frac{\sin \vartheta}{(\tau-1)} [y_1(2+y) + x(Y_1 \cos \vartheta - y_1)] (\tau |G_M(q^2)|^2 - |G_E(q^2)|^2) - \\
& -x \frac{zd}{2y^3} \frac{\sin \vartheta}{(\tau-1)^2} [y_1(2-x) + xY_1 \cos \vartheta] [2(1-x) + y(Y_1 - y)] |G_M(q^2) - G_E(q^2)|^2 - \\
& -d \frac{x}{y} \frac{\sin \vartheta}{\tau-1} \{ -2ycos \vartheta (Y_1 - y)(Y_1 + y_1 \cos \vartheta) + 2y_1(1-x)(2Y_1 + 2y + y_1 \cos \vartheta) + x^2yy_1 + \\
& + Y_1 \cos \vartheta [8(1-x) - Y_1 - 4y_1 \cos \vartheta + (2-x^2)y] + \frac{1}{xd} [(2-4x+x^2)y_1 - 2y_1(Y_1 + y_1 \cos \vartheta) - \\
& -x^2Y_1 \cos \vartheta] \} (\tau |G_M(q^2)|^2 - \text{Re}G_E(q^2)G_M^*(q^2)),
\end{aligned}$$

where we introduce the notations

$$z = y^2 + (1-x)(Y_1 - y_1 \cos \vartheta)(Y_1 - y_1 \cos \vartheta - 2), \quad d = \frac{1}{y(y+Y_2)}, \quad Y_2 = \frac{E_2}{E}.$$

For completeness we give also the nonzero coefficients in the case of longitudinally polarized electron beam

$$\begin{aligned}
F(L,x)D(x)P_{xy} &= -\frac{1}{2}xy_1 \frac{\sin^2 \vartheta}{\tau-1} F^{pol}(L,x) \text{Im}G_M(q^2)G_E^*(q^2), \\
F(L,x)D(x)P_{yx} &= -\frac{1}{2}xy_1 d \frac{\sin^2 \vartheta}{\tau-1} F^{pol}(L,x) [2(1-x) + y(Y_1 - y)] \text{Im}G_M(q^2)G_E^*(q^2), \\
F(L,x)D(x)P_{zy} &= \frac{1}{2} \frac{y_1}{y} \frac{\sin \vartheta}{\tau-1} F^{pol}(L,x) [(2-x)y_1 + xY_1 \cos \vartheta] \text{Im}G_M(q^2)G_E^*(q^2),
\end{aligned} \tag{80}$$

$$F(L, x)D(x)P_{yz} = \frac{y_1 \sin \vartheta}{2 \tau - 1} F^{pol}(L, x) \{d(y_1 + x \cos \vartheta)[(2-x)y + 2(1-x)] - x \cos \vartheta\} \text{Im} G_M(q^2) G_E^*(q^2).$$

### PHOTON ENERGY DISTRIBUTION

Let us calculate the differential cross section of the reaction (1) for the experimental conditions when only the energy of the collinear photon is measured. To do this, it is necessary to calculate the quantity  $d\sigma^\gamma / dx$ , i.e., we have to integrate the differential cross section (62) over the nucleon angular variables. The invariant integration of the hadronic tensor is the simplest method to do this.

Let us define the following quantity

$$F_{\mu\nu} = \int H_{\mu\nu} \frac{d^3 \vec{p}_1}{(2\pi)^3 2E_1} \frac{d^3 \vec{p}_2}{(2\pi)^3 2E_2} \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p_1 - p_2 - k). \quad (81)$$

Using the requirements of the Lorentz invariance and  $q_\mu H_{\mu\nu} = q_\nu H_{\mu\nu} = 0$  (it is a consequence of the hadron current conservation) the most general expression for the  $F_{\mu\nu}$  tensor can be written as

$$F_{\mu\nu} = A(q^2) \tilde{g}_{\mu\nu}. \quad (82)$$

Only unpolarized part of the hadronic tensor  $H_{\mu\nu}(0)$  gives nonzero contribution to the Eq. (81) since we integrate over the variables of the nucleon–antinucleon pair. To calculate the  $A(q^2)$  function it is necessary to multiply by  $g_{\mu\nu}$  tensor the left and right sides of Eq. (81) and this leads to the following result

$$A(q^2) = \frac{1}{3} \int H_{\mu\nu}(0) g_{\mu\nu} \frac{d^3 \vec{p}_1}{(2\pi)^3 2E_1} \frac{d^3 \vec{p}_2}{(2\pi)^3 2E_2} \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p_1 - p_2 - k). \quad (83)$$

The contraction of the hadron  $H_{\mu\nu}(0)$  and  $g_{\mu\nu}$  tensors can be written in terms of the structure functions  $H_i(q^2)$ ,  $i = 1, 2$

$$H_{\mu\nu}(0) g_{\mu\nu} = 3H_1(q^2) + M^2(1-\tau)H_2(q^2). \quad (84)$$

This contraction can be written also in terms of the nucleon electromagnetic form factors

$$H_{\mu\nu}(0) g_{\mu\nu} = -8M^2 [|G_E(q^2)|^2 + 2\tau |G_M(q^2)|^2]. \quad (85)$$

The easiest way to do the integration over the variables of the nucleon–antinucleon final state is to use the center-of-mass system of this pair. As a result we have

$$A(q^2) = -\frac{2}{3} \frac{M^2}{(2\pi)^5} \sqrt{1 - \frac{4M^2}{q^2}} [|G_E(q^2)|^2 + 2\tau |G_M(q^2)|^2]. \quad (86)$$

Representing the square of the matrix element as contraction of the lepton and hadron tensors we can write the expression for the differential cross section as (we integrate over the angular variables of the collinear photon)

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx} = 4\pi^4 x \alpha^3 \frac{1}{q^4} F_{\mu\nu} L_{\mu\nu}^\gamma. \quad (87)$$

Since the  $F_{\mu\nu}$  tensor is symmetric (over the  $\mu, \nu$  indices) only unpolarized part of the lepton tensor gives nonzero contribution. As a result we have for the differential cross section  $d\sigma^\gamma / dx$  (where  $x$  is the beam energy fraction carried away by the emitted collinear (to the direction of the electron momentum) photon in the  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}\gamma$  reaction)

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx} = \frac{8\pi}{3} \frac{\alpha^2}{q^4} M^2 \sqrt{1 - \frac{4M^2}{q^2}} F(L, x) [|G_E(q^2)|^2 + 2\tau |G_M(q^2)|^2]. \quad (88)$$

The limit of the point-like final particles (for example, the  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-\gamma$  reaction) is given by

$$\frac{d\sigma_{point}^\gamma}{dx} = \frac{4\pi}{3} \frac{\alpha^2}{q^2} \sqrt{1 - \frac{4M^2}{q^2}} \left(1 + 2\frac{M^2}{q^2}\right) F(L, x). \quad (89)$$

Let us write the energy spectrum of the collinear photon in the terms of the structure functions, which define the spin-independent part of the hadron tensor, for the case of two final particles with different masses. We have

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx} = \frac{\pi}{3} \frac{\alpha^2}{q^4} \sqrt{\left(1 + \frac{M_1^2 - M_2^2}{q^2}\right)^2 - 4\frac{M_1^2}{q^2}} F(L, x) \left\{ -3H_1(q^2) + \frac{1}{4M_1^2 q^2} [(q^2 + M_1^2 - M_2^2)^2 - 4M_1^2 q^2] H_2(q^2) \right\}. \quad (90)$$

And the spin-independent part of the hadron tensor is written in this case as

$$H_{\mu\nu}(0) = H_1(q^2) \tilde{g}_{\mu\nu} + \frac{1}{M_1^2} H_2(q^2) \tilde{p}_{1\mu} \tilde{p}_{1\nu}, \quad (91)$$

where  $M_1$  is the mass of the particle with four-momentum  $p_{1\mu}$ . Using this equation we can calculate the contributions of some various channels to the energy spectrum.

#### Spin-zero particles.

Consider the production of two spinless particles (for example,  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\gamma, K^+K^-\gamma$ ). The electromagnetic current of the hadrons in this case is determined by one complex form factor and the explicit expression of this current can be written as

$$J_\mu = F(q^2) (p_1 - p_2)_\mu \phi_1^* \phi_2^*, \quad (92)$$

where  $p_{1\mu} (p_{2\mu})$  and  $\phi_1 (\phi_2)$  are the four-momentum and wave function of the first (second) spinless particle. The structure functions in this case are

$$H_1(q^2) = 0, H_2(q^2) = M^2 |F(q^2)|^2, \quad (93)$$

where  $M$  is the spinless particle mass.

#### Spin-one particles.

Consider the production of two spin-one particles (for example,  $e^+e^- \rightarrow \rho^+\rho^-\gamma, d\bar{d}\gamma$ ). The electromagnetic current for a spin-one particle is completely described by three complex form factors. Assuming the  $P$ - and  $C$ -invariance of the hadron electromagnetic interaction, this current can be written as

$$J_\mu = (p_1 - p_2)_\mu [-G_1(q^2) U_1^* \cdot U_2^* + \frac{1}{M^2} G_3(q^2) (U_1^* \cdot q U_2^* \cdot q - \frac{q^2}{2} U_1^* \cdot U_2^*) - G_2(q^2) (U_{1\mu}^* U_2^* \cdot q - U_{2\mu}^* U_1^* \cdot q)], \quad (94)$$

where  $U_{1\mu} (U_{2\mu})$  is the polarization four-vector describing the first (second) spin-one particle.

The form factors  $G_i(q^2)$  are related to the standard electromagnetic form factors:  $G_C$  (charge monopole),  $G_M$  (magnetic dipole) and  $G_Q$  (charge quadrupole) by

$$G_M = -G_2, G_Q = G_1 + G_2 + 2G_3, G_C = -\frac{2}{3} \tau (G_2 - G_3) + (1 - \frac{2}{3} \tau) G_1. \quad (95)$$

The standard electromagnetic form factors have the following normalizations

$$G_C(0) = 1, G_M(0) = \mu, G_Q(0) = -M^2 Q,$$

where  $\mu(Q)$  is the magnetic (quadrupole) moment of a spin-one particle. The structure functions in this case are



$$H_1(q^2) = 8M^2\tau(1-\tau)|G_M|^2, H_2(q^2) = 12M^2(|G_C|^2 - \frac{2}{3}\tau|G_M|^2 + \frac{8}{9}\tau^2|G_Q|^2), \quad (96)$$

where  $M$  is the spin-one particle mass. The form factors of the  $\rho$ -meson, deuteron in the time-like region of the momentum transfer were discussed in Refs. [37, 38].

Channel  $\pi a_1$ .

Let us consider the production of  $\pi$ -meson and  $a_1(1260)$ , where  $a_1(1260)$  is the axial-vector meson with the following quantum numbers  $I^G(J^{PC}) = 1^-(1^{++})$ . This channel gives a substantial contribution to the  $e^+e^- \rightarrow 4\pi$  process. In the energy region  $1 \leq W \leq 2.5$  GeV ( $W$  is the total energy of the colliding beams) the process of four pion production is one of the dominant processes of the reaction  $e^+e^- \rightarrow hadrons$ .

The electromagnetic current of the  $\gamma^* \rightarrow \pi a_1$  transition is described by two complex form factors. Assuming the  $P$ - and  $C$ -invariance of the hadron electromagnetic interaction this current can be written as [39]

$$J_\mu = F_1(q^2)(q^2 U_\mu^* - q \cdot U^* q_\mu) + F_2(q^2)(q \cdot p_2 U_\mu^* - q \cdot U^* p_{2\mu}), \quad (97)$$

where  $U_\mu$  is the polarization four-vector describing the spin-one  $a_1$ -meson,  $p_{2\mu}$  is the pion four-momentum and  $F_i(q^2)$  are the electromagnetic form factors describing the  $\gamma^* \rightarrow \pi a_1$  transition. The structure functions corresponding to this current are

$$H_1(q^2) = -|q^2 F_1 + \frac{1}{2}(q^2 - M_1^2 + M_2^2)F_2|^2, H_2(q^2) = q^2[q^2|F_1 + F_2|^2 - M_1^2|F_2|^2], \quad (98)$$

where  $M_1(M_2)$  is the  $a_1$ -meson (pion) mass.

Channel  $\Delta \bar{N}$ .

Let us consider the production of antinucleon and  $\Delta(1232)$ -isobar with the  $I(J^P) = 3/2(3/2^+)$ . One can expect that this channel gives a substantial contribution to the  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}\pi$  process. The electromagnetic current of the  $\gamma^* \rightarrow \Delta \bar{N}$  transition is described by three complex form factors and it can be written as [40]

$$J_\mu = \bar{u}_\alpha(p_1)\gamma_5\{F_1(q^2)q_\alpha[q^2\gamma_\mu + (M_1 + M_2)q_\mu] + F_2(q^2)q_\alpha[\gamma_\mu + \frac{1}{M_1 - M_2}(p_1 - p_2)_\mu] + F_3(q^2)[(M_1 + M_2)g_{\mu\alpha} + q_\alpha\gamma_\mu]\}v(p_2), \quad (99)$$

where  $M_1(M_2)$  and  $p_1(p_2)$  are the mass and four-momentum of the  $\Delta$ -isobar (antinucleon).  $F_i(q^2)(i=1,2,3)$  are the electromagnetic form factors describing the  $\gamma^* \rightarrow \Delta \bar{N}$  transition. The structure functions corresponding to this current are

$$H_1(q^2) = -\frac{1}{3}(M_1M_2 + r)[\frac{1}{M_1^2}(M_1M_2 - r)|F|^2 + (M_1 + M_2)^2|F_3|^2 - \frac{1}{M_1}(M_1M_2 - r)(M_1 + M_2)ReFF_3^*], \quad (100)$$

$$H_2(q^2) = \frac{2}{3}(M_1^2M_2^2 - r^2)[|F|^2 - 2ReFF_3^*] - \frac{1}{3}(M_1 + M_2)[(M_1 - M_2)(M_2^2 - M_1^2) +$$

$$+ M_2q^2]ReFF_3^* - \frac{1}{3}M_1^2(M_1M_2 + r)[\frac{4q^2}{(M_1 - M_2)^2}|F_2|^2 - \frac{1}{M_1^2}|(M_1 + M_2)F_3 + \frac{q^2 + M_1^2 - M_2^2}{M_1 - M_2}F_2|^2],$$

where  $F = q^2F_1 + F_2 + F_3$ ,  $r = (q^2 - M_1^2 - M_2^2)/2$ .

### RADIATIVE RETURN. LARGE ANGLES

Let us consider the experimental conditions when the nucleon-antinucleon pair is not detected. We assume that the apparatus detect events in the whole phase space of the nucleon-antinucleon pair. So, it is necessary to integrate the differential cross section (42) over the variables of this pair. This procedure is already done in the Section "PHOTON

ENERGY DISTRIBUTION". Using these results we have for the energy and angular distribution of the photon

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx d\Omega_\gamma} = 4\pi^4 x \alpha^3 \frac{1}{q^4} A(q^2) \tilde{g}_{\mu\nu} L_{\mu\nu}^\gamma(0), \quad (101)$$

where the function  $A(q^2)$  has the following form for the general case of two particles with unequal masses

$$A(q^2) = \frac{1}{12} \frac{1}{(2\pi)^5} \frac{1}{q^2} \sqrt{(q^2 + M_1^2 - M_2^2)^2 - 4M_1^2 q^2} \quad (102)$$

$$\{3H_1(q^2) - \frac{1}{4M_1^2 q^2} [(q^2 + M_1^2 - M_2^2)^2 - 4M_1^2 q^2] H_2(q^2)\},$$

where  $M_1$  and  $M_2$  are the masses of the final particles. The structure functions  $H_i(q^2)$  describe the hadronic tensor  $H_{\mu\nu}(0)$  for the case of two-particle final state. The expressions of the structure functions in terms of the electromagnetic form factors of the transition  $\gamma^* \rightarrow h_1 h_2$  can be found in the Section "PHOTON ENERGY DISTRIBUTION" for some particular final states. After calculation of the convolution of the  $L_{\mu\nu}^\gamma(0)$  and  $\tilde{g}_{\mu\nu}$  tensors we have for the distribution (neglecting terms proportional to the electron mass)

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx d\Omega_\gamma} = 32\pi^4 x \alpha^3 \frac{1}{q^4} A(q^2) \{1 - \frac{1}{t_1 t_2} [q^4 + 2q^2 q \cdot k + 2(q \cdot k)^2]\}. \quad (103)$$

Let us choose the  $z$  axis along the electron momentum, and the photon momentum in the  $xz$  plane. Then integrating over the whole range of the photon azimuthal angle we obtain

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dx dc} = 2(2\pi)^5 x \alpha^3 \frac{1}{q^4} A(q^2) [1 - \frac{2}{x^2} \frac{2-2x+x^2}{1-\beta_e^2 c^2}], \quad (104)$$

where  $\beta_e^2 = 1 - 4m^2/s$ ,  $c = \cos\vartheta_\gamma$ ,  $\vartheta_\gamma$  is the angle between the electron and photon momenta.

Integrating this expression over the photon polar angle within the range  $m/E \ll \vartheta_1 < \vartheta_\gamma < \vartheta_2$ , where  $(\pi - \vartheta_2) \gg m/E$ , we obtain the following expression for the differential cross section

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dq^2} = 2(2\pi)^5 \alpha^3 \frac{1}{sq^4} A(q^2) [(c_1 - c_2)(1 - \frac{q^2}{s}) - \frac{1+q^4/s^2}{1-q^2/s} \ln \frac{(1+c_1)(1-c_2)}{(1-c_1)(1+c_2)}], \quad (105)$$

where  $c_i = \cos\vartheta_i$ . Let us rewrite this formula in another form introducing the total cross section of the  $e^+e^- \rightarrow h_1 h_2$  reaction. We have

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dq^2} = \frac{2}{3} \frac{\alpha^3}{sq^2} R(q^2) [(c_1 - c_2)(1 - \frac{q^2}{s}) - \frac{1+q^4/s^2}{1-q^2/s} \ln \frac{(1+c_1)(1-c_2)}{(1-c_1)(1+c_2)}], \quad (106)$$

where we define

$$R(q^2) = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow h_1 h_2)}{\sigma(e^+e^- \rightarrow \mu^+ \mu^-)} = \frac{1}{4} \frac{1}{q^4} \sqrt{(q^2 + M_1^2 - M_2^2)^2 - 4M_1^2 q^2} \times \quad (107)$$

$$\{-3H_1(q^2) + \frac{1}{4M_1^2 q^2} [(q^2 + M_1^2 - M_2^2)^2 - 4M_1^2 q^2] H_2(q^2)\}.$$

If we integrate the expression (104) over the photon polar angle within the following range  $m/E \ll \vartheta_\gamma^{min} < \vartheta_\gamma < \pi - \vartheta_\gamma^{min}$  we obtain the following result for the differential cross section of the  $e^+e^- \rightarrow h_1 h_2 \gamma$

reaction

$$\frac{d\sigma^\gamma}{dq^2} = \frac{4}{3} \frac{\alpha^3}{s q^2} R(q^2) \left[ \frac{1+q^4/s^2}{1-q^2/s} \ln \frac{1+c_m}{1-c_m} - \left(1 - \frac{q^2}{s}\right) c_m \right], \quad (108)$$

where  $c_m = \cos \mathcal{G}_\gamma^{min}$ . If we put  $h_1 h_2 = N\bar{N}$ , then  $R(q^2) = (\beta/2)[2|G_{MN}(q^2)|^2 + (1/\tau)|G_{EN}(q^2)|^2]$  and the expression for  $d\sigma^\gamma/dq^2$  for the case  $h_1 h_2 = N\bar{N}$  coincides with the one obtained in Ref. [30].

### CONCLUSIONS

The emission of the hard photon by the electron or positron is considered in the  $e^- + e^+ \rightarrow N + \bar{N} + \gamma$ . The nucleon polarization and the differential cross sections for some experimental conditions have been calculated.

The case of the emission of the collinear (with respect to the direction of the electron beam momentum) photon is considered separately. The differential cross section, the nucleon polarization, the correlation coefficients for both polarized nucleon and antinucleon (provided the electron beam is unpolarized or longitudinally polarized), the transfer polarization from the longitudinally polarized electron beam to the nucleon have been calculated.

We have calculated the photon energy distribution for the reaction  $e^+ e^- \rightarrow B_1 \bar{B}_2 \gamma$ , where  $B_1(\bar{B}_2)$  is some baryon (antibaryon) for the case of the collinear (with respect to the direction of the electron beam momentum) photon, emitted in the initial state. As  $B_1 \bar{B}_2$  final state we considered some channels, namely: two spinless mesons (for example,  $\pi^+ \pi^-$ ,  $K^+ K^-$ ), two spin-one particles (for example,  $\rho^+ \rho^-$ ,  $d\bar{d}$ ), the  $\pi a_1(1260)$  and  $\Delta(1232)\bar{N}$  channels. The photon energy distributions have been calculated in terms of the electromagnetic form factors of the  $\gamma^* \rightarrow B_1 \bar{B}_2$  transition.

### ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by the Ministry of Education and Science of Ukraine (Projects No. 0115U000474 and No. 0117U004866). The research was conducted in the scope of the IDEATE International Associated Laboratory (LIA).

### REFERENCES

1. Pacetti S., Baldini Ferroli R., Tomasi-Gustafsson E. Proton electromagnetic form factors: Basic notions, present achievements and future perspectives // Phys. Rep. – 2015. – Vol.550-551. – P.1-103.
2. Rosenbluth M.N. High Energy Elastic Scattering of Electrons on Protons // Phys. Rev. – 1950. – Vol.79. – P.615-619.
3. Arnold R.G. et al. Measurement of the Electron-Deuteron Elastic Scattering Cross-Section in the Range  $0.8 < q^2 < 6 \text{ GeV}^2$  // Phys. Rev. Lett. – 1975. – Vol.35. – P.776.
4. Jones M. K. et al.  $G_{E_p} / G_{M_p}$  ratio by polarization transfer in  $\bar{e}p \rightarrow e\bar{p}$  // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol.84. – P.1398-1402.
5. Gayou O. et al Measurements of the elastic electromagnetic form-factor ratio  $\mu_p G_{E_p} / G_{M_p}$  via polarization transfer // Phys. Rev. – 2001. – Vol.C64. – 038202.
6. Gayou O. et al. Measurement of  $G_{E_p} / G_{M_p}$  in  $\bar{e}p \rightarrow e\bar{p}$  to  $q^2 = 5.6 \text{ GeV}^2$  // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol.88. – 092301.
7. Punjabi V. et al. Proton elastic form-factor ratios to  $Q^2 = 3.5 \text{ GeV}^2$  by polarization transfer// Phys. Rev. – 2005. – Vol.C71. – 055202.
8. Puckett A., Brash E., Jones M. et al., Recoil polarization measurements of the proton electromagnetic form factor ratio to  $Q^2 = 8.5 \text{ GeV}^2$  // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol.104. – 242301.
9. Perdrisat C.F., Punjabi V., Vanderhaeghen M. Nucleon Electromagnetic Form Factors // Prog. Part. Nucl. Phys. – 2007. – Vol.59. – P.694-764.
10. Guichon P.A.M., Vanderhaeghen M. How to reconcile the Rosenbluth and the polarization transfer method in the measurement of the proton // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol.91. – 142303.
11. Blunden P. G., Melnitchouk W, and Tjon J. A. Two photon exchange and elastic electron proton // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol.91. – 142304.
12. Bystritskiy Yu.M., Kuraev E.A., Tomasi-Gustafsson E. Structure function method applied to polarized and unpolarized electron-proton scattering: A solution of the  $G_{E_p} / G_{M_p}$  discrepancy // Phys. Rev. – 2007. – Vol.C75. – 015207.
13. Tomasi-Gustafsson E., Gakh G.I., Search for evidence of two photon contribution in elastic electron proton data // Phys. Rev. – 2005. – Vol.C72. – 015209.
14. Rekaló M.P., Tomasi-Gustafsson E. Model independent properties of two photon exchange in elastic electron proton scattering // Eur. Phys. J. – 2004. – Vol.A22. – P.331-336.
15. Rekaló M.P., Tomasi-Gustafsson E., Complete experiment in  $e^{\bar{p}}N$  elastic scattering in presence of two-photon exchange // Nucl. Phys. – 2004. – Vol.A740. – P.271-286.
16. Rekaló M.P., Tomasi-Gustafsson E., Polarization phenomena in  $e^{\bar{p}}N$  elastic scattering, for axial parametrization of two photon exchange// Nucl. Phys. – 2004. – Vol.A742. – P.332-334.

17. Gakh G.I., Tomasi-Gustafsson E., Polarization effects in the reaction  $\bar{p} + p \rightarrow e^+ + e^-$  in presence of two-photon exchange // Nucl. Phys. – 2005. – Vol.A761. – P.120-131.
18. Gakh G.I., Tomasi-Gustafsson E., General analysis of polarization phenomena in  $e^+ + e^- \rightarrow N + \bar{N}$  for axial parametrization of two-photon exchange // Nucl. Phys. – 2006. – Vol.A771. – P.169-183.
19. Bakulev A.P., Radyushkin A.V., Stefanis N.G., Form-factors and QCD in space - like and time - like // Phys. Rev. – 2000. – Vol.D62. – 113001.
20. Hammer H.-W., Meisner Ulf-G., Drechsel D., Dispersion theoretical analysis of the nucleon electromagnetic form-factors: Inclusion of timelike data // Phys. Lett. – 1996. – Vol. B385. – P.343-347.
21. Tomasi-Gustafsson E., Rekaló M.P., Search for evidence of asymptotic regime of nucleon electromagnetic form-factors from a compared analysis in space- and time - like regions // Phys. Lett. – 2001. – Vol.B504. – P.291-295.
22. Iachello F., Wan Q., Structure of the nucleon from electromagnetic timelike form factors // Phys. Rev. – 2004. – Vol.C69. – 055204.
23. Bijker R., Iachello F., Structure of the nucleon from electromagnetic timelike form factors // Phys. Rev. – 2004. – Vol.C69. – 068201.
24. Antonelli A. et al. The first measurement of the neutron electromagnetic form-factors in the timelike region // Nucl. Phys. – 1998. – Vol.B517. – P.3-35.
25. Andreotti M. et al., Measurements of the magnetic form-factor of the proton for timelike momentum transfers // Phys. Lett. – 2003. – Vol.B559. – P.20-25.
26. Pasqualucci E., FENICE results and a proposal for a new measurement of nucleon timelike form-factors // Prog. Part. Nucl. Phys. – 2000. – Vol.44. – P.175-184.
27. Filippi A., Precision measurements of the nucleon form factor in the time-like region with FINUDA at DAFNE2 // eConf C0309101. – 2003. – FRWP005.
28. Dubnickova A. Z., Dubnicka S., Rekaló M. P., Investigation of the nucleon electromagnetic structure by polarization effects in  $e^+e^- \rightarrow N\bar{N}$  processes // Nuovo Cim. – 1996. – Vol.A109. – P.241-256.
29. Haidenbauer J., Kang X.-W., Meißner U. The electromagnetic form factors of the proton in the timelike region // Nucl.Phys. – 2014. – Vol. A929. – P.102-118.
30. Brodsky S.J., Carlson C.E., Hiller J.R., Hwang D.S. Single spin polarization effects and the determination of time - like proton form-factors // Phys. Rev. – 2004. – Vol.D69. – 054022.
31. Czyz H., Kuhn J.H., Nowak E., Rodrigo G. Nucleon form-factors, B meson factories and the radiative return // Eur. Phys. J. – 2004. – Vol.C35. – P.527536.
32. Gakh G.I., Merenkov N.P., QED corrections in deep-inelastic scattering from tensor polarized deuteron target // JETP Lett. – 2001. – Vol.73. – P.579-583.
33. Afanasev A.V., Akushevich I., Gakh G.I., Merenkov N.P. Radiative corrections to polarized inelastic scattering in coincidence // JETP. – 2001. – Vol.93. – P.449-461.
34. Bonneau G., Martin F. Hard photon emission in  $e^+e^-$  reactions // Nucl. Phys. – 1971. – Vol.B27. – P.381-397.
35. Berends F.A., Kleiss R. Initial State Radiation for  $e^+e^-$  Annihilation Into Jets // Nucl. Phys. – 1981. – Vol.B178. – P.141-150.
36. Baier V.N., Fadin V.S., Khoze V.A. Quasireal electron method in high-energy quantum electrodynamics // Nucl. Phys. – 1973. – Vol.B65. – P.381-396.
37. Gakh G.I., Tomasi-Gustafsson E., Adamuscin C., Dubnicka S., Dubnickova A.Z. Polarization effects in  $e^+ + e^- \rightarrow \bar{d} + d$  and determination of time like deuteron form factors // Phys. Rev. – 2006. – Vol.C74. – 025202.
38. Adamuscin C., Gakh G.I., Tomasi-Gustafsson E. Polarization effects in the reaction  $e^+ + e^- \rightarrow \rho^+ + \rho^-$  and determination of the  $\rho$  meson form factors in the time-like region // Phys. Rev. – 2007. – Vol.C75. – 065202.
39. Altukhov A.M., and Khriplovitch I. On multiple pion production in experiments with colliding electron- positron beams // Yad.Fiz. – 1972. – Vol.14. – P.783-787. (in Russian)
40. Kramer G., Walsh T.F., Quasi two body  $e^+e^-$  annihilation // Z.Phys. – 1973. – Vol.263. – P.361-386.

PACS: 13.66.Bc, 13.66.Jn

**CURRENT STATUS OF  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  STUDY. EXPERIMENT AND THEORY****O.N. Shekhovtsova***NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"**Akademicheskaya, 1, 61108 Kharkov, Ukraine**E-mail: [shekhovtsova@kipt.kharkov.ua](mailto:shekhovtsova@kipt.kharkov.ua)*

Received November 15, 2017

In this note I review the current status of electron-positron annihilation into the  $\pi^+\pi^-\eta$  final state from both experimental and theoretical sides. The theoretical studies of the reaction are discussed in framework of three theoretical approaches: the Vector Meson Dominance Model, the Resonance Chiral Theory with vector and axial-vector resonances and within the extended nonlocal version of the Nambu-Jona-Lasinio model. In the case of the Vector Meson Dominance model the three vector  $\rho$  - mesons are included, i.e. the main  $\rho(770)$  state and the excited  $\rho(1400)$  and  $\rho(1700)$  states. For the theoretical approach based on the Resonance Chiral Theory lagrangian the theoretical prediction includes either the lightest  $\rho(770)$  state only or the superposition of the main state  $\rho(770)$  with the  $\rho(1400)$ ,  $\rho(1700)$  states. Finally, the theoretical calculations in the framework of the Nambu-Jona-Lasinio model include both the lightest  $\rho(770)$  state and its first excited state  $\rho(1400)$ . To sum up the theoretical predictions of these three approaches are compared with the recent experimental data from Novosibirsk groups (SND and CMD experiments) and from the BaBar Collaboration. In addition, main points of studies on application of the Conservation Current hypothesis to estimate the cross channel decay width,  $\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau$ , are discussed. The last subject is an investigation of the OZI and G-parity violated decay  $\phi \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ .

**KEYS WORDS:** precise measurements in electron-positron annihilation, meson production, CVC study, low-energy hadronic interaction

**ПОТОЧНИЙ СТАН ДОСЛІДЖЕНЬ ПРОЦЕСА  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ . ЕКСПЕРИМЕНТ ТА ТЕОРІЯ****О.Н. Шеховцова***ННЦ "Харьковский физико-технический институт"**61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна*

У цій статті представлено огляд поточного стану експериментальних і теоретичних досліджень реакції електронно-позитронної анігіляції в кінцевий стан  $\pi^+\pi^-\eta$ . Теоретичні дослідження реакції обговорюються в рамках трьох теоретичних підходів: у моделі Векторної Домінантності, в Резонансній Киральної теорії з векторними і аксиально-векторними резонансами, а також в розширеній нелокальній версії моделі Намбу-Йона-Ласінію. Теоретичні розрахунки у рамках моделі Векторної Домінантності включають вклади від трьох проміжних векторних  $\rho$ -мезонів, тобто включені основний стан  $\rho(770)$  і збуджені стани  $\rho(1400)$ ,  $\rho(1700)$ . Теоретичні прогнози які ґрунтуються на лагранжіані Резонансної Киральної теорії включають в себе або тільки основний стан  $\rho(770)$ , або суперпозицію основного стану  $\rho(770)$  зі збудженими станами  $\rho(1400)$ ,  $\rho(1700)$ . Нарешті, теоретичні розрахунки у рамках моделі Намбу-Йона-Ласінію включають як основний  $\rho(770)$  стан, так і його перший збуджений стан  $\rho(1400)$ . Резюмуючи, теоретичні прогнози у рамках трьох теоретичних підходів перелічених вище порівнюються з останніми експериментальними даними Новосибірських груп (експерименти SND та CMD) і колаборації BaBar. Крім того, обговорюються основні моменти теоретичних досліджень по вживанню гіпотези збереження векторного струму для оцінки ширини розпаду в крос-каналі  $\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau$ . Остання тема даного огляду - дослідження рідкісного процесу розпаду  $\phi \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ , який відбувається з порушенням ОЗІ і G-парності.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** точні вимірювання в електрон-позитронній анігіляції, народження мезонів, дослідження ЗВС, адронна взаємодія при низьких енергіях

**ТЕКУЩИЙ СТАТУС ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОЦЕССА  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ . ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ****О.Н. Шеховцова***ННЦ "Харьковский физико-технический институт"**61108, Академическая, 1, Харьков, Украина*

В этой статье рассмотрен текущий статус экспериментальных и теоретических исследований реакции электронно-позитронной аннигиляции в конечное состояние  $\pi^+\pi^-\eta$ . Теоретические исследования реакции обсуждаются в рамках трех теоретических подходов: в модели Векторной Доминантности, в Резонансной Киральной теории с векторными и аксиально-векторными резонансами, а также в расширенной нелокальной версии модели Намбу-Йона-Ласинио. Теоретические расчеты в рамках модели Векторной Доминантности включают вклады от трех промежуточных векторных  $\rho$ -мезонов, т.е.

включены основное состояние  $\rho(770)$  и возбужденные состояния  $\rho(1400), \rho(1700)$ . Теоретические предсказания основанные на лагранжиане Резонансной Киральной теории включает в себя либо одно основное состояние  $\rho(770)$ , либо суперпозицию основного состояния  $\rho(770)$  с возбужденными состояниями  $\rho(1400), \rho(1700)$ . Наконец, теоретические расчеты в рамках модели Намбу-Йона-Ласинио включают как основное состояние  $\rho(770)$ , так и его первое возбужденное состояние  $\rho(1400)$ . Резюмируя, теоретические предсказания в рамках трех теоретических подходов перечисленных выше сравниваются с последними экспериментальными данными Новосибирских групп (эксперименты SND и CMD) и коллаборации BaBar. Кроме того, обсуждаются основные моменты теоретических исследований по применению гипотезы сохранения векторного тока для оценки ширины распада в кросс-канале  $\tau^- \rightarrow \pi^- \pi^0 \eta \nu_\tau$ . Последняя тема данного обзора - исследование редкого процесса распада  $\phi \rightarrow \pi^+ \pi^- \eta$ , который происходит с нарушением правила ОЗИ и G-четности.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** точные измерения в электронно-позитронной аннигиляции, рождение мезонов, исследование СВТ, адронное взаимодействие при низких энергиях

The data on the  $e^+e^-$  - annihilation in the energy region below 2.-2.5 GeV is the main source of information about properties of the light vector mesons and is of great interest for a better understanding of the light quark interactions. For the process

$$e^+ + e^- \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \eta \quad (1)$$

the main mechanism of production proceeds through one intermediate state  $\eta\rho(770)$ <sup>1</sup> which makes the precise measurements of the cross section of the reaction (1) of great importance for the determination of the  $\rho(1400)$  and  $\rho(1700)$  parameters. In addition, the  $\pi^+\pi^-\eta$  gives about 5% contribution to the total hadronic cross section in the energy region about 1.5 GeV that, in its turn, through the dispersion relation contributes to the anomalous magnetic moment of the muon. Also data on  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  can be used to test the conservation of the vector current (CVC) hypothesis.

The reaction (1) was first observed at the end of 70's in the DM1 experiment [1] and since that time it has been studied by Orsay [2], Novosibirsk [3,4,5,6] groups and by the BaBar collaboration [7,8]. From a theoretical point of view the  $\pi^+\pi^-\eta$  production in the  $e^+e^-$  - annihilation and  $\tau$ -lepton decay was discussed in [4,9,10,11] using different approaches.

The paper is organized as follows. In Section "Theoretical Models" the theoretical approaches to describe the hadronic current for  $\gamma^* \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \eta$  are described. The experimental data are reviewed in Section "Experimental data". Section "Check of the CVC hypothesis" is devoted to the CVC study and comparison with the spectral function of the  $\tau^- \rightarrow \pi^- \pi^0 \eta \nu_\tau$  decay. The subject of the last section is the rare decay  $\phi \rightarrow \pi^+ \pi^- \eta$ .

Therefore the main goal of this paper is to summarize and systemize the current experimental and theoretical status of the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  study as well as to show up the main problems of the experimental data analysis of the reaction in the energy region of 2 GeV.

### THEORETICAL MODELS

The description of hadronic interactions in the energy region populated by resonances is problematic. In fact, perturbative QCD does not work in the region below 2 GeV. At very low energies ( $E \ll M_\rho$ ), Chiral Perturbation Theory (ChPT), based on the chiral symmetry of massless QCD, provides successful description of hadronic interactions. At higher energy there is no a similar framework and we have to rely on some phenomenological models. Three theoretical models have been applied to study the process (1) and they are shortly described below.

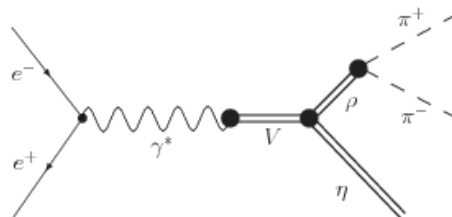


Fig. 1. The diagram of the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  process in the framework of the VMD model

<sup>1</sup>A production via  $e^+e^- \rightarrow a_2(1320)\pi$  can contribute to the cross section, however, this reaction is suppressed and has not been observed. To my knowledge there is no theoretical prediction for this reaction as well.

The Vector Meson Dominance (VMD) model with three intermediate  $\rho$  meson states is a generally accepted scheme in the contemporary  $\pi\pi\eta$  data analysis. It is characterized by the Feynman diagram shown in Fig. 1, where the intermediate resonance  $V$  represents the mesons  $\rho(770)$ ,  $\rho(1400)$ ,  $\rho(1700)$ . The corresponding cross section at the total initial squared energy  $s$  can be written as [5]

$$\sigma(s) = \frac{4\alpha^2}{3} \frac{1}{s\sqrt{s}} \int_{4m_\pi^2}^{(\sqrt{s}-m_\eta)^2} \frac{\sqrt{q^2}\Gamma_\rho(q^2)P_\eta^3(s,q^2)}{(q^2-m_\rho^2)^2+(\sqrt{q^2}\Gamma_\rho(q^2))^2} |F(s)|^2 dq^2, \quad (2)$$

where the kinematical function  $P_\eta^2(s,q^2)=[(s-m_\eta^2-q^2)^2-4m_\eta^2q^2]/4s$  and  $q$  is the 4-momentum of the  $\pi^+\pi^-$  system. The transition form factor  $F(s)$  describes the subprocess  $\gamma^* \rightarrow V \rightarrow \eta\rho$  and takes the form:

$$F(s) = \sum_V \frac{g_V e^{i\phi_V} m_V^2}{s-m_V^2+i\sqrt{s}\Gamma_V(s)}, \quad (3)$$

where  $g_V e^{i\phi_V} = g_{V\rho\eta} / g_{V\gamma}$ ,  $g_{V\rho\eta}$  and  $g_{V\gamma}$  are the coupling constants for the transitions  $V \rightarrow \rho\eta$  and  $V \rightarrow \gamma^*$ , respectively. Here the energy dependence of the  $\rho$ -meson widths is driven by two-pion loops

$$\Gamma_V(q^2) = \Gamma_V \frac{m_V^2}{q^2} [p_\pi(q^2) / p_\pi(m_V^2)]^3, \quad p_\pi(q^2) = \sqrt{q^2 - 4m_\pi^2}.$$

Since the coupling constants are not expected to have sizable imaginary parts, the fit to the experimental data is done assuming the phases  $\phi_{\rho(1400)}$  and  $\phi_{\rho(1700)}$  equal either to zero or  $\pi$  (if the reference  $\rho(770)$  phase is put equal to zero). The SND Collaboration analysis [5] favours  $\phi_{\rho(1400)} = \phi_{\rho(1700)} = \pi$ . Notice that the fit with  $\rho(1700)$  is slightly better than without it; however, the value obtained for  $g_{\rho(1700)}$  deviates from zero by only  $2\sigma$ . Therefore any clear conclusion about the presence of the  $\rho(1700)$  state cannot be drawn.

The description of the process (1) within the framework of the Resonance Chiral Theory (RChT) [12] is presented in [9,10]. The RChT model is based on the ChPT approach with the explicit inclusion of the vector and axial-vector resonances. Its main features can be summarized in two points: 1) the RChT Lagrangian explicitly contains the ChPT one and hence the RChT amplitudes satisfy chiral symmetry and match the chiral amplitudes at low energies; 2) the high-energy amplitudes of the hadronic form factors provided by RChT are suppressed, as enforced by QCD. Therefore, both high and low energy limits are included correctly in the Resonance Chiral Theory. The  $\pi\pi\eta$  production in the RChT framework is described by the diagrams in Fig. 2. Leaving only the diagram 2d), we obtain the VMD approach. In Ref. [9], in addition to the photon propagation, only the lightest  $\rho(770)$  resonance was considered.

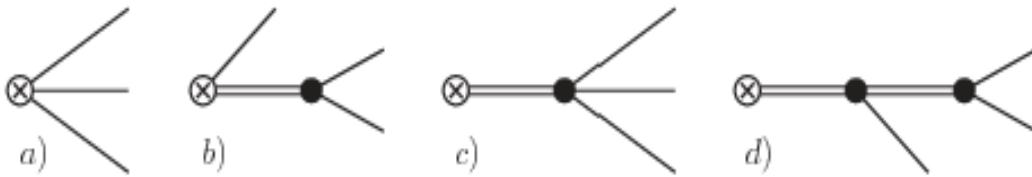


Fig. 2. Hadronization of the vector current in  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  within the RChT approach. Single lines represent pseudoscalar mesons ( $\pi, \eta$ ) and double lines are for the  $\rho$  resonances.

The diagram a) corresponds to the Wess-Zumino-Witten interaction Lagrangian, the diagrams b), c) and d) to the effective Lagrangian describing interactions with resonances

A comparison with experimental data [1-4,7] demonstrates a fair agreement in the energy region from the  $\eta\rho$  threshold up to 1.4 GeV (Fig. 3, left panel), for details see [9]. An extended approach of RChT to study the reaction  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta(\pi^0)$ , including the excited  $\rho(1400)$  and  $\rho(1700)$  mesons as well as tiny isospin symmetry breaking effects, was proposed in [10]. In order to obtain the values of the model parameters, fits based on different sets of  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  and  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  data were carried out. For details, see Section VII of [10]. Comparison between the theoretical prediction for the cross section of process (1) and the experimental data is presented in Fig. 3, right panel. Notice, in addition, that the fit favors an higher mass for the  $\rho(1400)$  resonance ( $M_{\rho'} = 1.55$  GeV instead of its PDG value  $M_{\rho'} = 1.465(25)$  GeV) and lower width ( $\Gamma_{\rho'} = 0.238$  GeV instead of its PDG value  $\Gamma_{\rho'} = 0.400(60)$  GeV).

Also the contribution of the  $\rho(1700)$  is one half that of the  $\rho(1400)$ . As in the case of the VMD approximation described above the fit favors to the destructive contributions of both excited  $\rho$ -states compared with  $\rho(770)$ .

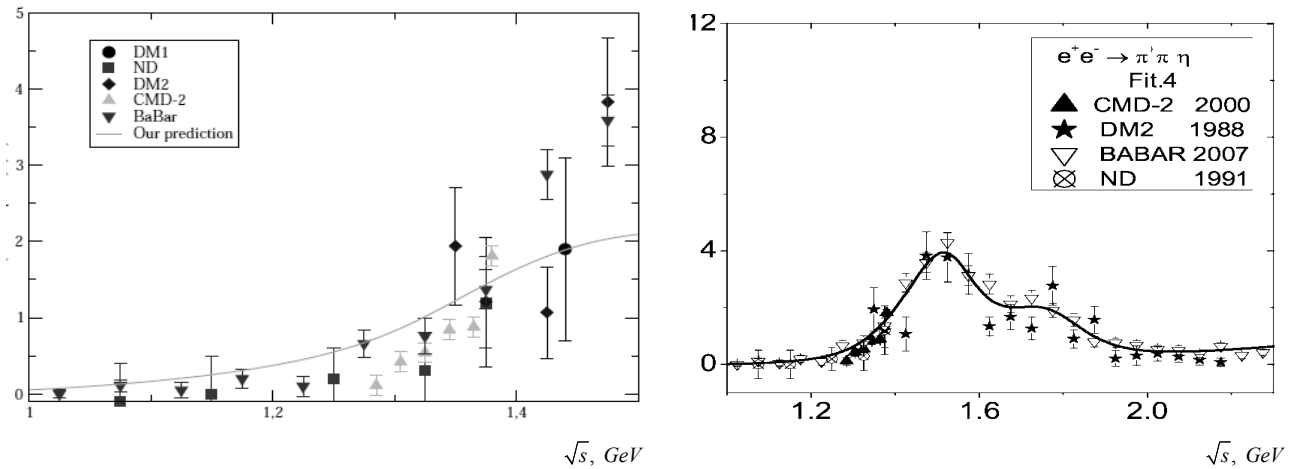


Fig. 3. Comparison between the experimental data for the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  cross section and the theoretical prediction based on the RChT approach. The left panel corresponds to the propagation via  $\gamma + \rho(770)$  [9], the right one to the elaborated model used in Ref. [10]. The figures are taken from [9, 10]

The reaction (1) within the extended nonlocal version of the Nambu-Jona-Lasinio (NJL) model studied in [11,13] and the corresponding Feynman diagrams are shown in Fig. 4. The standard NJL model describes the physical processes via intermediate states of a virtual photon and  $\rho$  and  $\omega$  mesons in its ground state. The contribution of the first radially excited meson states is included in the extended NJL model and provides a reasonable good description of a wide range of physical processes for the energy region up to about 1.5 GeV [13].

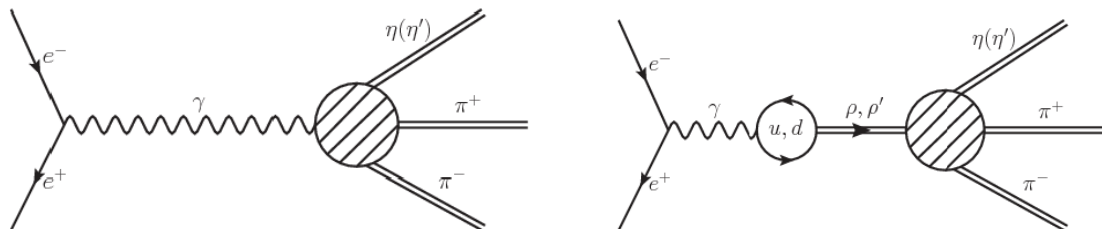


Fig. 4. Electron-positron annihilation with  $\pi\pi\eta$  production within the NJL approach

The left diagram corresponds to the production via virtual photon, the right one is via intermediate  $\rho(770)$ ,  $\rho(1400)$  states. The dashed circles are the sum of two subdiagrams from Fig. 5.

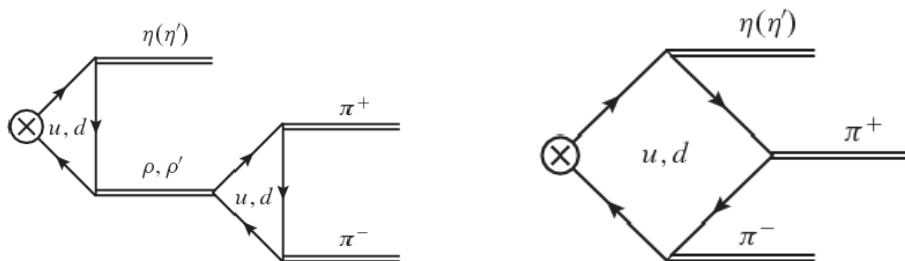


Fig. 5. Vertex subdiagrams  $V\eta\pi\pi$  with a quark box loop (left) and with two quark-triangle loops (right).

Hadronization mechanism to produce  $\pi\pi\eta$  is presented in Fig. 5. The VMD approach could be directly obtained from the NJL model by taking into account only the diagram with the triangle loops. Precise formulae for the cross section can be found in Section III of [11]. Numerical values of the model parameters are fixed in Eq. (4) of [11] whereas for the resonance masses and widths their PDG values are chosen. The comparison with the BaBar data [7] is



presented in Fig. 6 and as one can see the theoretical spectrum qualitatively reproduces the experimental data.

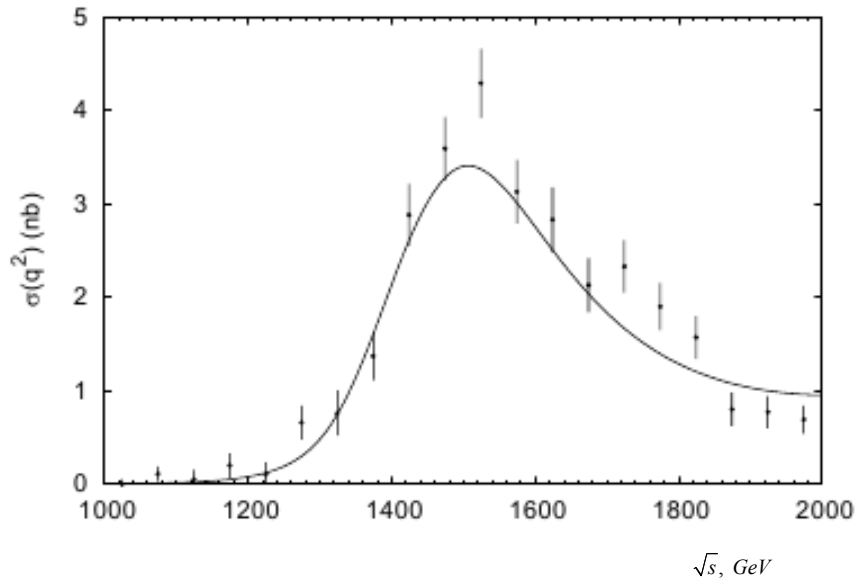


Fig. 6. Comparison of the extended NJL model with the BaBar data [7]. The figure is taken from [11]

#### EXPERIMENTAL DATA

As the  $\eta$  meson is a short lifetime particle it is observed decaying either in  $\pi^+\pi^-\pi^0$  or via its  $\gamma\gamma$  decay. Therefore the process (1) contributes to the experimentally measured reactions:  $e^+e^- \rightarrow 2(\pi^+\pi^-)\pi^0$  and  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\gamma\gamma$ .

The process (1) was first observed at the end of the 70's in the DM1 experiment [1]<sup>2</sup> for the center-of-mass (CM) energy region 1.4-2.8 GeV. The DM1 experiment data analysis demonstrated that the  $\rho\eta$  production only via the intermediate  $\rho(770)$  resonance [16], predicts a cross section of about 0.5 nb, an order of magnitude below the experimental data. To solve the problem, the production via the intermediate  $\rho(1600)$  was added. The ND Collaboration [3] studied the process in the CM energy region 1.05-1.40 GeV. The data analysis showed the same excess of production compared with the theoretical prediction [15] for energies above 1.35 GeV (Fig. 7), confirming the hypothesis that the main contribution in this energy region comes from the intermediate  $\rho(1600)$  meson.

Further comparison of the  $\eta\rho$  mass spectrum in diffractive photoproduction [16] and  $e^+e^-$ -annihilation has brought to the idea of the existence of two excited states of the  $\rho$ -resonance with a mass of 1.47 GeV and 1.70 GeV, see [17]. This parametrization (the VMD model) has been described at the beginning of Section "Theoretical Models" and since the DM2 experiment it is the generally accepted pattern in the  $\pi\pi\eta$  data analysis.

Later the process was studied by Orsay (DM2 Collaboration) [2] and Novosibirsk groups (SND, CMD experiments) [3,4]. The most recent measurements were performed at the VEPP-2000 collider by the SND group [5] for the CM energy range from 1.22 to 2.00 GeV (the  $\eta$  meson is reconstructed via the two-photon mode) and at B-factory with the BaBar detector, using the initial state radiation technique [7] in the (1.025; 2.975) GeV CM energy region (the  $\eta$  meson is reconstructed via three-pion mode). Systematic uncertainties of about 8% at BaBar [7] and below 8.3% by the SND experiment [5] were reported. The preliminary results from BaBar using the  $\eta \rightarrow \gamma\gamma$  channel [8] and from the CMD-3 collaboration using both  $\eta \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  and  $\eta \rightarrow \gamma\gamma$  decay modes have been presented recently [6].

The recent experimental results are presented in Figs. 3, 7 and as seen all measurements are consistent. The cross section behaves in the following way: it shows a steep rise starting from the  $\eta\rho(770)$  threshold, peaking at about 1.5 GeV, and then decreases with increasing energy. The measured  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  cross section was fitted using the VMD model (Section "Theoretical Models") with and without  $\rho(1700)$  contribution. Based on the fit results one cannot draw a definite conclusion that at the current statistics the  $\rho(1700)$  contribution is needed for the description of the data.

<sup>2</sup>In fact the  $e^+e^-$ -annihilation into five pions was observed by the M3N collaboration [15], however, the intermediate mechanisms producing the final state were not studied.

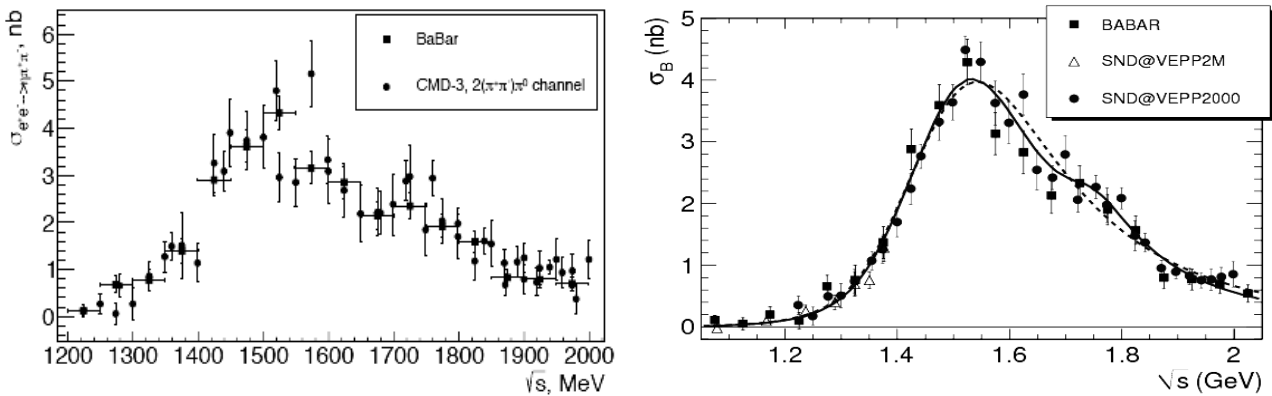


Fig. 7. Experimental data for the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  cross section from the BaBar, CMD and SND Collaborations  
The figures are taken from Refs. [5, 6]

### CHECK OF THE CVC HYPOTHESIS

The data on electron-positron annihilation with  $\pi\pi\eta$  production can be used to estimate the branching fraction of the  $\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau$  decay [18] and test of the CVC hypothesis.

The hypothesis of conserved vector current [19] and isospin symmetry is based on two assumptions: first, it assumes that the isovector part of the electromagnetic current and the vector part of the hadronic weak current are only different components of the same isospin current and, second, that the three components of this isospin current are conserved. As a consequence, hadronic currents describing vector  $\tau$  decays and hadronic low energy (up to the  $\tau$  lepton mass)  $e^+e^-$ -annihilation are related and can be obtained one from the other. The CVC hypothesis study has a long story for the two- and four-pion final states [20]. However, a systematical study of CVC relations requires to include all available experimental information on various final states.

Applying the CVC hypothesis for the  $\pi\pi\eta$  final state one can relate the experimentally measured cross section of the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  process and the branching fraction of the  $\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau$  decay [18]:

$$\frac{Br(\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau)}{Br(\tau^- \rightarrow \nu_\tau e^- \bar{\nu}_e)} = \frac{3|V_{ud}|^2 S_{EW}}{2\pi\alpha^2} \int_{4m_\pi^2}^{\infty} dq^2 \frac{q^2}{m_\tau^2} \left(1 - \frac{q^2}{m_\tau^2}\right)^2 \left(1 + \frac{2q^2}{m_\tau^2}\right) \sigma_{e^+e^- \rightarrow \eta\pi\pi}(q^2), \quad (4)$$

where  $S_{EW}$  is an electroweak correction ( $S_{EW} = 1.0194$ ) and the  $V_{ud}$  is the  $ud$  element of the Cabibbo-Kobayashi-Maskawa matrix. The theoretical estimation of  $Br(\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau)$  is summarized in the Table. As one can see the branching ratio derived from the  $e^+e^-$  CMD-2 and old data is in agreement with the world average experimental value whereas the newer BaBar value is slightly above it. A possible source of this difference might be an yet unknown isospin breaking corrections.

Table

$Br(\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau)$  value obtained on the base of the CVC hypothesis from the  $e^+e^-$  data and its average world experimental value (PDG).

Experimental group	Old $e^+e^-$ data	BaBar 2007	Old $e^+e^-$ data + BaBar 2007	BaBar 2016	BaBar 2007+2016	CMD-2	PDG
$Br_i$ %	$0.13 \pm 0.015$	$0.165 \pm 0.015$	$0.153 \pm 0.018$	$0.16 \pm 0.009$	$0.162 \pm 0.008$	$0.156 \pm 0.004$	$0.139 \pm 0.007$
Reference	[18]	[18]	[18]	[8]	[8]	[4]	[21]

### RARE DECAY $e^+e^- \rightarrow \phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$

Investigation of the energy dependence of the process (1) cross section for the center mass energy near the  $\phi$  meson mass is necessary for the search of the rare  $\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  decay. This latter is both the Okubo-Zweig-Iizuka rule suppressed and G-parity violating process. Its branching ratio has been theoretically estimated within VMD:  $Br(\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-) = 0.35 \cdot 10^{-6}$  [22] and its influence on the  $\eta\pi^+\pi^-$  cross section is shown in Fig. 8. A small peak near the threshold is caused by the rare  $\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  decay. For illustrative purposes the low energy region is presented in Fig. 8a. The upper limit was measured by the CMD-2 Collaboration and is  $Br(\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-) < 1.8 \cdot 10^{-5}$  with 90%

confidence level [23]. Therefore the current experimental upper limit is about 50 times above than its theoretical prediction.

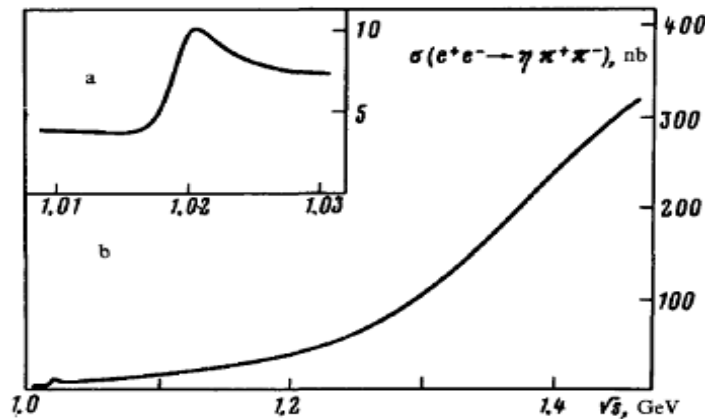


Fig. 8. The VMD prediction for the  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  cross section taking into account the rare  $\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  decay. The figure is taken from Ref. [22]: b – the whole energy spectrum, a – corresponds to the low energy zoom in to show a small peak due to the rare  $\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  decay.

### CONCLUSION

Summarizing, during the last decade the process of  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  has been studied both by theoreticians, using the description based on the Resonance Chiral Lagrangian or the extended Nambu-Jona-Lasinio model, and by experimental collaborations. The data sets at centre mass energies 1.-2. GeV have been collected in  $e^+e^-$  -annihilation by the CMD and SND Collaborations (Novosibirsk, VEPP-2M collider) and using the radiative return technique at the SLAC B-factory with the BaBar detector. The systematic uncertainty has been decreased substantially compared with the old experiments and reached the level below 8% (the preliminary analysis by CMD-3 claims even a 5% level). The data of the three experiments are in agreement. However, a more detailed study based on the cross section approximation proposed in [18] might be applied for a better comparison between the data in whole energy region.

To fit the measured cross section, the VMD model with three isovector states  $\rho(700)$ ,  $\rho(1400)$  and  $\rho(1700)$  has been used. However, the current statistics does not allow to conclude whether the  $\rho(1700)$  is necessary to reproduce the data. New more precise measurements at energies above 1.4 GeV will be necessary to study the region in detail and to draw a conclusion about the  $\rho(1700)$ . This study will require an estimate of a background related with the production via  $a_2(1320)$  ( $e^+e^- \rightarrow \rho(1400;1700) \rightarrow a_2^\pm \pi^m \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$ ), but to my knowledge the corresponding process has not yet been calculated theoretically and will be a subject of my future study.

Also new measurements at low energies near the  $\phi$  meson region are important to improve our knowledge about the rare decay  $\phi \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  (the upper experimental limit is 50 times higher than the theoretical prediction). This is planned to be done at the KLOE-2 experiment.

Assuming the isospin invariance the  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  cross section via the CVC relation predicts the branching ratio  $\tau^- \rightarrow \pi^-\pi^0\eta\nu_\tau$ . Therefore comparison between the predicted value and its measured value contributes to tests of the CVC hypothesis. Currently the branching ratio derived from the CMD-2 and old  $e^+e^-$  data is in agreement with the average experimental value whereas the predicted value based on the recent BaBar data is slightly above it. A possible source of this difference might be due to not yet calculated isospin-breaking corrections.

Last but not least, the  $\pi^+\pi^-\eta$  contribution gives about 5% to the total hadronic cross section at energy  $\sqrt{s} = 1.5$  GeV and therefore gives a non-negligible contribution to the anomalous magnetic moment of muon,  $(g-2)_\mu$ .

All that makes the reaction  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\eta$  an important process of future theoretical and experimental studies.

### REFERENCES

1. Delcourt B., Bisello D., Bizot J.C., Buon J., Cordier A., Mane F. Study of the reactions  $e^+e^- \rightarrow \rho\eta, \rho\pi, \phi\pi$  and  $\phi\eta$  for total energy ranges between 1.4 and 2.18 GeV // Phys. Lett. - 1979. - Vol. B 113. - P. 93 - 97.
2. Antonelli A. et al. [DM2 Collaboration]. Measurement of the reaction  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  in the center-of-mass energy interval 1350 -MeV to 2400 -MeV // Phys. Lett. - 1988. - Vol. B 212. - P. 133 - 138.

3. Druzhinin V.P. et al.. Investigation of the reaction  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  in the energy range up to 1.4 GeV // Phys. Lett. - 1986. - Vol. B 174. - P. 115 - 117.
4. Akhmetshin R.R. et al. [CMD-2 Collaboration]. Study of the process  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^+\pi^-\pi^0$  with CMD-2 detector // Phys. Lett. - 2000. - Vol. B 489. - P. 125 - 130.
5. Aulchenko V.M. et al. [SND Collaboration]. Measurement of the  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  cross-section in the center-of-mass energy range 1.22-2.00 GeV with the SND detector at the VEPP-2000 collider // Phys. Rev. - 2015. - Vol D 91. - P. 052013.
6. Solodov E.P. et al. Recent results from CMD-3 detector at VEPP-2000  $e^+e^-$ -collider // AIP Conf. Proc. - 2016. - Vol. 1735. - P. 020005.
7. Aubert B. et al. [BaBar Collaboration]. The  $e^+e^- \rightarrow 2(\pi^+\pi^-)\pi^0$ ,  $2(\pi^+\pi^-)\eta$ ,  $K^+K^-\pi^+\pi^-\pi^0$  and  $K^+K^-\pi^+\pi^-\eta$  Cross Sections Measured with Initial-State Radiation // Phys. Rev. - 2007. - Vol. D 76. - P. 092005.
8. Lees J.P. et al. [BaBar Collaboration]. Study of the process  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  using initial state radiation // arXiv: 1801.02960, <https://arxiv.org/pdf/1801.02960>.
9. Gomez Dumm D., Roig P. Resonance Chiral Lagrangian analysis of  $\tau \rightarrow \eta\pi^-\pi^0\nu_\tau$  decays // Phys. Rev. - 2012. - Vol. D 86. - P. 076009.
10. Dai L. Y., Portoles J., Shekhovtsova O. Three pseudoscalar meson production in  $e^+e^-$  annihilation // Phys. Rev. - 2013. - Vol. D 88. - P. 056001.
11. Volkov M.K., Arbuzov A.B., Kostunin D.G. The process  $e^+e^- \rightarrow \eta(\eta')2\pi$  in the extended Nambu-Jona-Lasinio model // Phys. Rev. - 2014. - Vol. C 89. - P. 015202.
12. Ecker G., Gasser J., Pich A., de Rafael E. The Role of Resonances in Chiral Perturbation Theory // Nucl. Phys. - 1989. - Vol. B 321. - P. 311 - 342.
13. Volkov M.K., Arbuzov A.B. Low-energy processes of meson production in the extended Nambu-Jona-Lasinio model // Phys. Part. Nucl. - 2016. - Vol. 47. - P. 489 - 507.
14. Cosme G. et al. Hadronic Cross-sections Study in  $e^+e^-$  Collisions From 1.350 GeV to 2.125 GeV // Nucl. Phys. - 1979. - Vol. B 152. - P 215 - 231.
15. Layssac J., Renard F.M. Hadronic production in  $e^+e^-$  collisions // Nuovo Cim. - 1971. - Vol. A 6. - P. 134 -150.
16. Atkinson M. et al. [Omega Photon Collaboration]. Observation of a Peak at 1.28-{GeV} in the  $\eta\pi^+\pi^-$  System in the Reaction  $\gamma p \rightarrow \eta\pi^+\pi^- p$  // Nucl. Phys. - 1984. - Vol. B 242. - P. 269 - 281.
17. Donnachie A., Clegg A.B.  $\eta\rho$  in diffractive photoproduction and  $e^+e^-$  annihilation // Z. Phys. - 1987. - Vol. C 34. - P. 257 - 260.
18. Cherepanov V., Eidelman S. Conserved vector current and decays  $\tau \rightarrow \eta(\eta')\pi^-\pi^0\nu_\tau$  // JETP Lett. - 2009. - Vol. 89. - P. 515 - 517.
19. Thacker H.B., Sakurai J.J. Lifetimes and branching ratios of heavy leptons // Phys. Lett. - 1971. - Vol. 36 B. - P. 103 - 105.
20. Davier M., Eidelman S., Hocker A. et al. Confronting spectral functions from  $e^+e^-$  annihilation and tau decays: Consequences for the muon magnetic moment // Eur. Phys. J. - 2004. - Vol. C 27. - P. 497- 521.
21. Patrignani C. et al. [Particle Data Group]. Review of Particle Physics // Chin. Phys. - 2016. - Vol. C 40. - P. 100001.
22. Achasov N.N., Karnakov V.A. On the research of the  $e^+e^- \rightarrow \eta\pi^+\pi^-$  reaction // JETP Lett. - 1984. - Vol. 39. - P. 342 - 345.
23. Akhmetshin R.R. et al. [CMD-2 Collaboration]. Observation of the  $\phi \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^+\pi^-$  // Phys. Lett. - 2000. - Vol. B 491. - P. 81-89.

PACS: 21.60.Gx, 25.30.Fj, 27.20.+n

## MANIFESTATION OF NUCLEAR CLUSTERIZATION IN COULOMB SUMS

**A.Yu. Buki, I.S. Timchenko**

*National Science Center "Kharkov Institute of Physics & Technology"*

*1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine*

e-mail: [timchenko@kipt.kharkov.ua](mailto:timchenko@kipt.kharkov.ua)

Received January 19, 2018

The new experimental Coulomb sums values of  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  nuclei have been obtained at momentum transfers range  $q = 0.750 \div 1.000 \text{ fm}^{-1}$  and  $q = 0.750 \div 1.125 \text{ fm}^{-1}$ , respectively, extending significantly the earlier reported momentum transfers range of Coulomb sums for these nuclei. The dependence of the  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  Coulomb sums on the momentum transferred is shown to differ substantially from same dependences for all the other investigated nuclei. It is suggested that the observed feature of the  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  Coulomb sums is related to a strong clusterization of these nuclei. The parameter  $q_p$  corresponding to the value of the momentum transferred, at which the Coulomb sum ceases to grow and remains constant for larger momentum transfers, is introduced. The values of the parameter  $q_p$  for the lithium isotopes nuclei were obtained ( $q_p({}^7\text{Li}) = 1.20 \pm 0.10 \text{ fm}^{-1}$  and  $q_p({}^6\text{Li}) = 1.35 \pm 0.10 \text{ fm}^{-1}$ ), which are much lower than  $q_p$  of  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$  and  ${}^{56}\text{Fe}$  nuclei ( $q_p \approx 2 \text{ fm}^{-1}$ ). The graph represented the  $q_p$  values of the nuclei as a function of the isolation parameter  $x$ , which characterizing the degree of nuclear clusterization, is constructed. The obtained graph shows the explicit proportionality of the  $q_p$  dependence from the parameter  $x$  and predicts the  $q_p$  value for the Coulomb sum of the  ${}^9\text{Be}$  nucleus not yet measured.

**KEY WORDS:** Coulomb sum, lithium isotopes, light and medium nuclei, nuclear clusterization, cluster isolation parameter  $x$

### ПРОЯВ КЛАСТЕРІЗАЦІЇ ЯДЕР В КУЛОНІВСЬКИХ СУМАХ

**О.Ю. Буки, І.С. Тімченко**

*Національний Науковий Центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*вул. Академічна, 1, м. Харків, 61108, Україна*

Отримано нові експериментальні значення кулонівських сум ядер  ${}^6\text{Li}$  та  ${}^7\text{Li}$  в діапазоні переданих імпульсів  $q = 0,750 \div 1,000 \text{ фм}^{-1}$  та  $q = 0,750 \div 1,125 \text{ фм}^{-1}$ , відповідно, які суттєво розширюють діапазон по  $q$  раніше опублікованих кулонівських сум цих ядер. Показано, що залежність кулонівських сум від переданого імпульсу ізотопів літію істотно відрізняються від таких же залежностей для всіх інших ядер. Висловлено припущення про те, що виявлена особливість кулонівських сум ядер  ${}^6\text{Li}$  та  ${}^7\text{Li}$  пов'язана з сильною кластерізацією цих ядер. Введено параметр  $q_p$ , що відповідає значенню переданого імпульсу, при якому кулонівська сума перестає рости, і залишається незмінною при більших переданих імпульсах. Отримано значення параметру  $q_p$  для ядер ізотопів літію ( $q_p({}^7\text{Li}) = 1,20 \pm 0,10 \text{ фм}^{-1}$  та  $q_p({}^6\text{Li}) = 1,35 \pm 0,10 \text{ фм}^{-1}$ ), які значно нижчі, ніж  $q_p$  для ядер  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$  та  ${}^{56}\text{Fe}$  ( $q_p \approx 2 \text{ фм}^{-1}$ ). Побудовано графік, на якому значення  $q_p$  низки ядер наведені як функція параметру відособленості  $x$ , що характеризує ступінь їх кластерізації. Цей графік показує явну пропорційність між величиною  $q_p$  та параметром  $x$  передбачає значення  $q_p$  для ще не виміряної кулонівської суми ядра  ${}^9\text{Be}$ .

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** кулонівська сума, ізотопи літію, легкі та середні ядра, кластерізація ядра, параметр відособленості  $x$

### ПРОЯВЛЕНИЕ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ЯДЕР В КУЛОНОВСКИХ СУММАХ

**А.Ю. Буки, И.С. Тимченко**

*Национальный Научный Центр "Харьковский физико-технический институт"*

*ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина*

Получены новые экспериментальные значения кулоновских сумм ядер  ${}^6\text{Li}$  и  ${}^7\text{Li}$  в диапазоне переданных импульсов  $q = 0,750 \div 1,000 \text{ фм}^{-1}$  и  $q = 0,750 \div 1,125 \text{ фм}^{-1}$ , соответственно, которые существенно расширяют диапазон по  $q$  ранее опубликованных кулоновских сумм этих ядер. Показано, что зависимость кулоновских сумм от переданного импульса ядер  ${}^6\text{Li}$  и  ${}^7\text{Li}$  существенно отличается от таких зависимостей для всех других ядер. Высказано предположение о том, что обнаруженная особенность кулоновских сумм ядер  ${}^6\text{Li}$  и  ${}^7\text{Li}$  связана с сильной кластеризацией этих ядер. Введён параметр  $q_p$ , соответствующий значению переданного импульса, при котором кулоновская сумма перестаёт расти и остаётся постоянной при больших переданных импульсах. Получены значения параметра  $q_p$  для ядер изотопов лития ( $q_p({}^7\text{Li}) = 1,20 \pm 0,10 \text{ фм}^{-1}$  и  $q_p({}^6\text{Li}) = 1,35 \pm 0,10 \text{ фм}^{-1}$ ), которые значительно ниже, чем  $q_p$  ядер  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$  и  ${}^{56}\text{Fe}$  ( $q_p \approx 2 \text{ фм}^{-1}$ ). Построен график, на котором значения  $q_p$  ряда ядер представлены как функция параметра обособленности  $x$  характеризующего степени их кластеризации. Этот график показывает явную пропорциональность величины  $q_p$  от параметра  $x$  и предсказывает значение  $q_p$  для ещё не измеренной кулоновской суммы ядра  ${}^9\text{Be}$ .

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** кулоновская сумма, изотопы лития, легкие и средние ядра, кластеризация ядра, параметр обособленности  $x$

In the double-differential cross-section for electron scattering by the nucleus, ( $d^2\sigma/d\Omega d\omega$ ), the contributions from the electron-nucleus interaction may be separated by means of longitudinal and transverse components of the electromagnetic field. Accordingly, these contributions are called the longitudinal and transverse response functions  $R_L(q,\omega)$  and  $R_T(q,\omega)$ , respectively. According to [1], the double-differential cross-section is related to the response functions by the equation

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}(\theta, E_0, \omega) = \sigma_M(\theta, E_0) \left\{ \frac{Q^4}{q^4} R_L(q, \omega) + \left[ \frac{1}{2} \frac{Q^2}{q^2} + \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right] R_T(q, \omega) \right\}, \quad (1)$$

where  $\omega$ ,  $q$ ,  $Q = (q^2 - \omega^2)^{1/2}$  are, respectively, the energy, 3-momentum, 4-momentum transferred to the nucleus by the incident electron of initial energy  $E_0$  and scattered by the angle  $\theta$ ;  $\sigma_M(E_0, \theta) = e^4 \cos^2(\theta/2) / [4 E_0^2 \sin^4(\theta/2)]$  is the Mott cross-section;  $e$  is the electron charge.

In the treatment of the experimental data, one must take into account the influence of the nuclear electrostatic field on the incident electron. For this purpose, the correction  $\Delta E_0$  is introduced into the definition of the 3-momentum transfer  $q = \{4(E_0 + \Delta E_0)[(E_0 + \Delta E_0) - \omega] \sin^2(\theta/2) + \omega^2\}^{1/2}$ . The correction  $\Delta E_0$  is given by  $k(3/2)Ze^2/R$ , where  $R$  is the radius of the equivalent homogeneous distribution. According to [2], for electrons scattered by light nuclei to the continuum region the coefficient  $k$  is equal to 0.8.

The experimental data on the longitudinal functions  $R_L(q, \omega)$  are generally represented as Coulomb sum

$$S_L(q) = \int_{\omega_{el}^+}^{\infty} \frac{R_L(q, \omega)}{[\tilde{G}_E(Q^2)]^2} d\omega, \quad (2)$$

where  $[\tilde{G}_E(Q^2)]^2 = Z\eta \left( [G_E^p(Q^2)]^2 + \frac{N}{Z} [G_E^n(Q^2)]^2 \right)$ . Here,  $\omega_{el}^+$ , being the lower limit of integral (2), corresponds to the energy transfer of the elastic electron scattering peak, and the superscript “+” excludes the contribution of this peak to the integral;  $N$  and  $Z$  denote the number of neutrons and protons in the nucleus, respectively;  $\eta = [1 + Q^2/(4M^2)] \times [1 + Q^2/(2M^2)]^{-1}$  is the correction for the relativistic effect of nucleon motion in the nucleus;  $M$  is the proton mass;  $G_E^p$  and  $G_E^n$  are the charge form factors of the proton and the neutron, respectively.

For all the nuclei studied, the behavior of  $S_L(q)$  with variations in the momentum transfer is similar in its character. With an increase in  $q$ , the  $S_L(q)$  increases until at a certain momentum transfer value denoted as  $q_p$ , the  $S_L(q)$  takes on constant values forming the function  $S_L(q)$  plateau. For almost all previously studied nuclei we have  $q_p \approx 2 \text{ fm}^{-1}$ . By way of illustration, Fig. 1 shows the experimental  $S_L(q)$  values for the  ${}^4\text{He}$  nucleus [3, 4, 5].

The authors of papers [6,7] have determined  $S_L(q)$  values for the  ${}^6\text{Li}$  nucleus, and have found that the behavior of the function differs from the usual one (Fig. 1). It can be seen that the  $S_L(q)$  function reaches the plateau at  $q_p \approx 1.4 \text{ fm}^{-1}$ , this being much earlier in  $q$  than in the case with  ${}^4\text{He}$  and other nuclei. In the  ${}^7\text{Li}$  case, in the measurement range  $q = 1.250 \div 1.625 \text{ fm}^{-1}$  [8], the function  $S_L(q)$  is constant within the experimental error and is equal to unity. It means that if the  $S_L(q)$  value is lower at certain momentum transfers, then it will reach the plateau range at  $q_p \leq 1.3 \text{ fm}^{-1}$ . Thus, the data of [8] do not specify  $q_p$  for the  ${}^7\text{Li}$  nucleus, but restrict the upper value of this quantity. The authors of works [7, 8] have put forward the hypothesis that a comparatively low  $q_p$  value in the  ${}^6,7\text{Li}$  case may be due to the Coulomb sum manifestation of clusterization peculiar to the nuclei under discussion.

However, on a more rigorous approach to the problem of relationship between the  $q_p$  value and nuclear

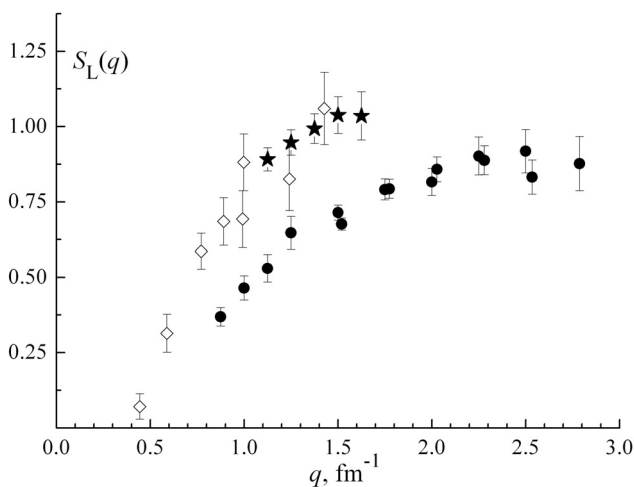


Fig. 1. Coulomb sums of  ${}^4\text{He}$  and  ${}^6\text{Li}$  nuclei. Full circles -  ${}^4\text{He}$  [3, 4, 5], diamonds -  ${}^6\text{Li}$  [6], full asterisks -  ${}^6\text{Li}$  [7].

clusterization it should be noted that this hypothesis is actually based only on the experimental  $q_p$  value of the  ${}^6\text{Li}$  nucleus. As regards the  $q_p$  value of  ${}^7\text{Li}$ , from the data of [8] it follows that it is not higher than that of  ${}^6\text{Li}$ , and it is not improbable that it may be substantially lower. The last version would be in contrast with the proposed hypothesis, because if the  $q_p$  value is related to the clusterization (and the nuclei  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  are close in the degree of clusterization), then the  $q_p$  values of these nuclei should also be little different from each other.

The aim of the present article is checking the hypothesis for the relationship between the nuclear clusterization and the momentum transfer value  $q_p$ . For the purpose it is necessary: a) to determine the  $q_p$  value for the  ${}^7\text{Li}$  nucleus; b) to define more exactly the  $q_p$  value for the  ${}^6\text{Li}$  nucleus; c) to obtain the  $q_p$  values for the previously investigated nuclei.

**THE EXPERIMENT AND TREATMENT OF THE MEASURED DATA**

The measurements, from which the present  $S_L(q)$  values were determined, were carried out at the experimental facility SP-95 with the use of the electron beam from the NSC KIPT electron linear accelerator LUE-300. The electron beam of monochromaticity between 0.4% and 0.6%, and of energies ranging from 104 to 259 MeV, was incident on the  ${}^6\text{Li}$  (or  ${}^7\text{Li}$ ) target, the isotopic enrichment of which in the nuclide of interest was determined to be 90.5% (or 93.8%),

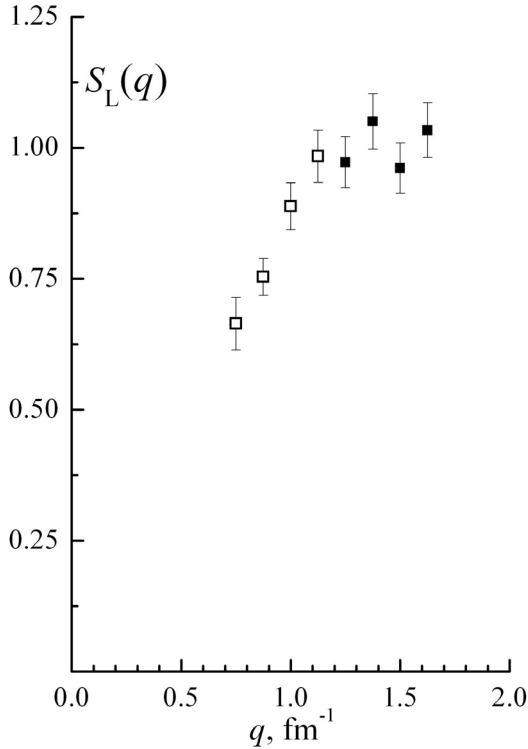


Fig. 2. Coulomb sum of  ${}^7\text{Li}$ . Full squares –  ${}^7\text{Li}$  [8]; open squares -  ${}^7\text{Li}$  (present data).

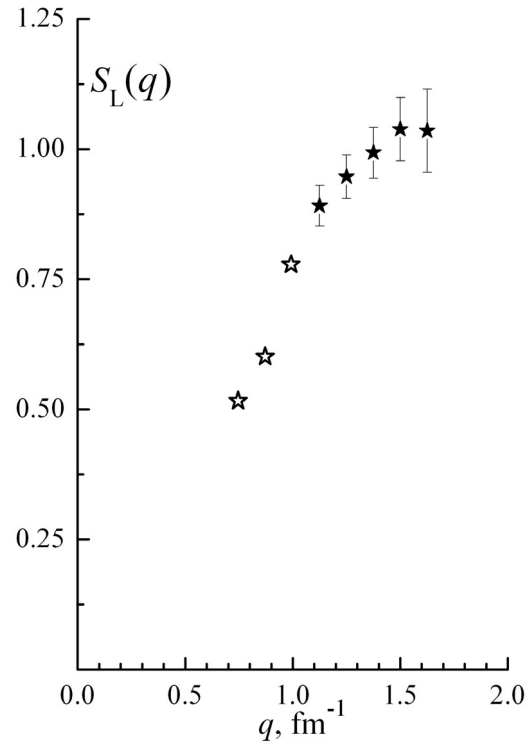


Fig. 3. Coulomb sum of  ${}^6\text{Li}$ . Full circles–  ${}^6\text{Li}$  [7]; open circles -  ${}^6\text{Li}$  (present data).

respectively. The measurements were performed at electron scattering angles from  $34.2^\circ$  up to  $160^\circ$ . For momentum analysis of scattered electrons we have used the spectrometer that had the second-order double focusing in vertical and horizontal planes [9]. Electrons in the focal plane of the spectrometer were registered by the 8-channel scintillation Cherenkov counter [10]. The description of the facility has been given in several publications [7,8,11,12].

The experiment was designed so that the response functions at several constant 3-momentum transfer values with  $q$  ranging from  $0.750$  to  $1.625 \text{ fm}^{-1}$ , and also, the Coulomb sums corresponding to these functions, could be obtained from the measurements. It should be mentioned that the most complicated and labor-consuming stage in these experiments is the processing of the measurement results for yielding the response functions and the Coulomb sums. Taking into account the long duration of the processing, the work was planned so as to obtain first the data measured at the highest  $q$  values, and then to process the data corresponding to lower momentum transfers. One of the advantages of this approach was the point that if the processing of a part of the experimental data yielded the physical data of prime interest, they could be discussed and submitted for publication at once, without waiting for the final processing of the whole body of initial measured data.

At the previous stage of measured data processing, we have obtained in this way four  $S_L(q)$  values for  ${}^7\text{Li}$  at  $q = 1.250 \dots 1.625 \text{ fm}^{-1}$  [8], and five  $S_L(q)$  values for  ${}^6\text{Li}$  at  $q = 1.125 \dots 1.625 \text{ fm}^{-1}$  [7].

By the present time, in addition to the above-given values, we have obtained  $S_L(q)$  values for  ${}^7\text{Li}$  at  $q = 0.750 \dots 1.125 \text{ fm}^{-1}$  (Fig. 2), and preliminary  $S_L(q)$  values for  ${}^6\text{Li}$  at  $q = 0.750 \dots 1.000 \text{ fm}^{-1}$  (Fig. 3).

**NUCLEAR CLUSTERIZATION AND THE COULOMB SUM**

To analyze the relationship between the momentum transfer  $q_p$  and the nuclear clusterization, the  $q_p$  value determination must be formalized using a certain simple procedure, which will be applied to the experimental  $S_L(q)$  values of the nuclei under consideration. We define  $q_p$  as the momentum transfer that corresponds to the point of intersection of two straight lines, one of which (horizontal) approximates the  $S_L(q)$  values on the plateau of  $S_L(q)$  as a function of  $q$ , and the other line approximates the  $S_L(q)$  values before reaching the plateau formation, starting from  $S_L \approx 2/3 \times S_{L,p}$ , where  $S_{L,p}$  is the  $S_L(q)$  value on the plateau. The given definition of the momentum transfer  $q_p$  is exemplified by the  $S_L(q)$  for the  ${}^4\text{He}$  nucleus (Fig. 4).

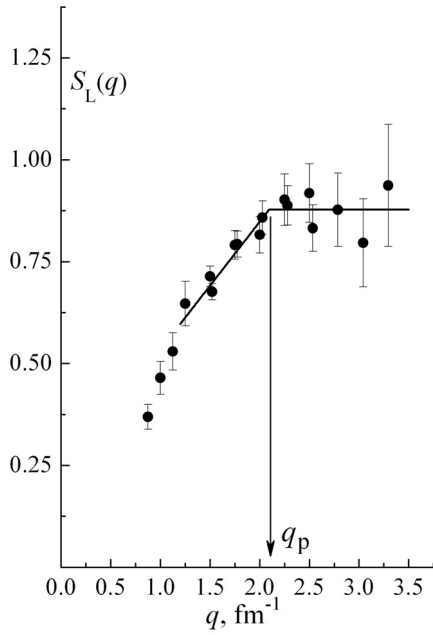


Fig. 4. Coulomb sum of  ${}^4\text{He}$ . Full circles –  ${}^4\text{He}$  [3,4,5]; horizontal and inclined lines – data fitting; the intersection of the lines determines the  $q_p$  value.

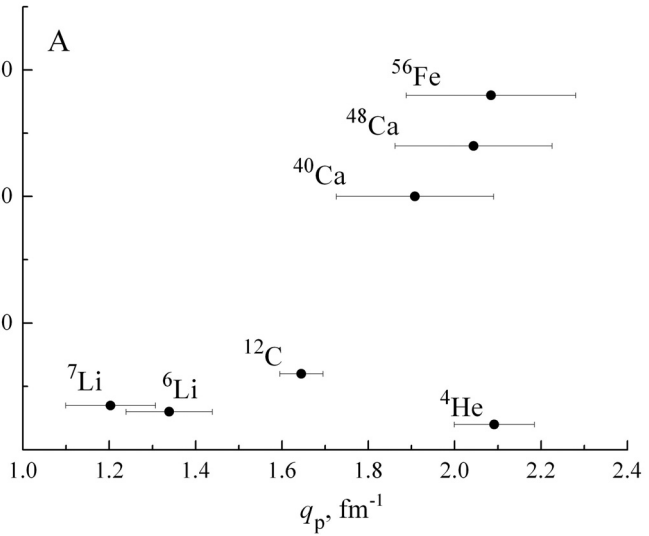


Fig. 5. Momentum transfers  $q_p$  for different nuclei with atomic mass  $A$ .

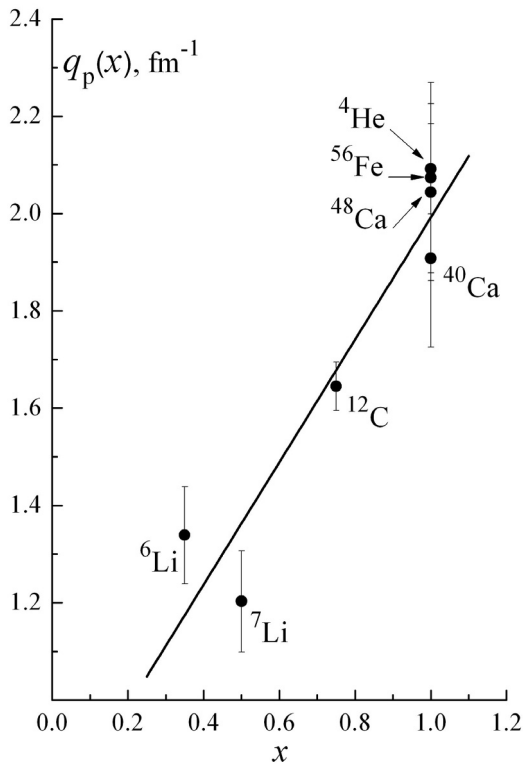


Fig. 6. Momentum transfer  $q_p$  versus the isolation parameter  $x$  for different nuclei. The straight line represents the data fitting by the linear dependence.

We apply this definition of  $q_p$  to all the nuclei having the atomic mass  $A \geq 4$ , for which a sufficient amount of experimental  $S_L(q)$  data is available known. These are the data of the present work and of our previous works on the nuclei  ${}^{6,7}\text{Li}$  [6, 7, 8],  ${}^4\text{He}$  [3] and  ${}^{12}\text{C}$  [13]. Besides, from [5], we have used the experimental  $S_L(q)$  data obtained at the Saclay and Bates Laboratories for  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$ ,  ${}^{56}\text{Fe}$ . The momentum transfers  $q_p$  derived from these data are shown in Fig. 5. It can be seen that the  $q_p$  values of the nuclei  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$ ,  ${}^{56}\text{Fe}$  are grouped at  $q_p = (1.9 \dots 2.1) \text{ fm}^{-1}$ , and in the case of  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  – at  $q_p = (1.20 \dots 1.35) \text{ fm}^{-1}$ . For the  ${}^{12}\text{C}$  nucleus we have  $q_p = 1.65 \text{ fm}^{-1}$ . The momentum  $q_p$  grouping of the nuclei, observed in Fig. 5, corresponds to their distribution over the isolation parameter  $x$ <sup>1/</sup>. The first-group nuclei are not clusterized, whereas the second-group nuclei are strongly clusterized. For example, for the  ${}^6\text{Li}$  nucleus, the parameter  $x$  varies between 0.3 and 0.4 [6,14,15], while for  ${}^7\text{Li}$  we have  $x = 0.5$  [14]. With this approach, we arrive at understanding of the intermediate value (between the two groups)  $q_p = 1.65 \text{ fm}^{-1}$  of the  ${}^{12}\text{C}$  nucleus, which is clusterized substantially less than the nuclei of the lithium isotopes. For the  ${}^{12}\text{C}$  nucleus, the parameter  $x$  ranges from 0.7 to 0.8 [14].

Let us consider the momentum  $q_p$  as a function of the parameter  $x$ . For this purpose we put the isolation parameter of the nuclei  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$ ,  ${}^{56}\text{Fe}$  to be equal to 1.0. As is obvious from Fig. 6, the  $x$  dependence of  $q_p$  is close to linear, this being in agreement with the result

<sup>1/</sup> The isolation parameter of the nuclear cluster “ $x$ ” defines the degree to which the clusters are formed within the nucleus [14]. The  $x$  value varies from  $x = 1$  (shell model, e.g.,  ${}^4\text{He}$ ) to  $x = 0$  (limiting case of the nuclear clusterization model).



of fitting the straight line to all the data with the least  $\chi_i^2$  value. Note that the observed dependence displays a high sensitivity of  $q_p$  to the  $x$  value. After refinement of  $q_p(x)^{2/}$ , this feature of the function considered might be used for determination of  $x$  from the  $q_p$  value. However, because of the laborious procedure of obtaining experimental Coulomb sums, this method would be hardly applicable in practice.

### RESULTS AND CONCLUSIONS

The results of the present work can be summarized as follows.

- A. Experimental  $S_L(q)$  values of the nuclei  ${}^6\text{Li}$  and  ${}^7\text{Li}$  have been obtained at momentum transfers  $q = 0.750 \dots 1.000 \text{ fm}^{-1}$  and  $q = 0.750 \dots 1.125 \text{ fm}^{-1}$ , respectively. This has essentially extended the range of the measured  $S_L(q)$  towards  $q$  values lower than those investigated in [7, 8].
- B. Using the  $S_L(q)$  data of the present work and of works [6-8], the momentum transfer  $q_p$  has been determined for the  ${}^7\text{Li}$  nucleus ( $q_p = 1.20 \pm 0.10 \text{ fm}^{-1}$ ), and has been redetermined more exactly for the  ${}^6\text{Li}$  nucleus ( $q_p = 1.35 \pm 0.10 \text{ fm}^{-1}$ ). The analysis of the available literature data on the Coulomb sums for  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{48}\text{Ca}$  and  ${}^{56}\text{Fe}$  has yielded the  $q_p$  values for the mentioned nuclei (Fig. 5).
- C. The momentum transfers  $q_p$  of nuclear lithium isotopes have been found to be much lower than those in the case of other nuclei.

The comparison of the present experimental data with the data obtained elsewhere for a number of nuclei has demonstrated the validity of the hypothesis as to the effect of nuclear clusterization on the Coulomb sum of the nucleus.

The effect manifests itself in the observable proportionality of the momentum transfer  $q_p$  to the isolation parameter  $x$ , which characterizes the degree of nuclear clusterization. The hypothesis under discussion is also supported by the Coulomb sum measurement data for the  ${}^9\text{Be}$  nucleus at  $q = 0.8 \dots 1.7 \text{ fm}^{-1}$ , from which the momentum  $q_p$  of this nucleus can be derived. Since the parameter  $x = 0.6$  [14], related to the  ${}^9\text{Be}$  nucleus, lies between the  $x$  values of the nuclei of lithium isotopes and the ones of  ${}^{12}\text{C}$ , then, according to the proposed hypothesis, its momentum transfer  $q_p$  should also lie between the  $q_p$  values of the mentioned nuclei, i.e., in the range from  $1.3 \text{ fm}^{-1}$  to  $1.6 \text{ fm}^{-1}$ .

### REFERENCES

1. de Forest T. Jr., Walecka J.D. Electron Scattering and Nuclear Structure // Ann. Phys. NY. – 1966. – Vol.15. – No.57. – P. 1–109.
2. Aste A. Coulomb distortion effects in quasi-elastic (e,e') scattering on heavy nuclei // Nucl. Phys. – 2008. – Vol.A806. – P. 191–215.
3. Buki A.Yu., Timchenko I.S., Shevchenko N.G., Nenko I.A. Coulomb sums of the  ${}^4\text{He}$  nucleus at  $q = 0.88$  to  $1.25 \text{ fm}^{-1}$  // Phys. Lett. – 2006. – Vol.B641. – P. 156–158.
4. von Reden K.F., Alcorn C., Dytman S.A., et al. Quasielastic electron scattering and Coulomb sum rule in  ${}^4\text{He}$  // Phys. Rev. – 1990. – Vol.C41. – P. 1084–1094.
5. Zghiche A., Danelet J.F., Bernhheim M., et al. Longitudinal and transverse responses in quasi-elastic electron scattering from  ${}^{208}\text{Pb}$  and  ${}^4\text{He}$  // Nucl. Phys. – 1994. – Vol.A572. – P. 513–559.
6. Buki A.Yu., Nenko I.A., Shevchenko N.G., Efros V.D. Experimental determination of the Coulomb energy of the nucleus  ${}^6\text{Li}$  // Sov. J. Nucl. Phys. – 1977. – Vol.25. – P. 246–247.
7. Buki A.Yu., Timchenko I.S., Shevchenko N.G. Saturation of Coulomb sum rules in the  ${}^6\text{Li}$  case // Eur. Phys. J. – 2012. – Vol.A48. – P. 17–22. DOI 10.1140/epja/i2012-12017-6.
8. Buki A.Yu., Shevchenko N.G., Timchenko I.S. Coulomb sums for  ${}^7\text{Li}$  nucleus at 3-momentum transfers  $q = 1.250 - 1.625 \text{ fm}^{-1}$  // PAST. – 2009. – Vol.3(51). – P. 38–42.
9. Afanasiev N.G., Goldstane V.A., Savitskiy G.A., et al. Magnetic spectrometer for particles with momentum up to 400 MeV/s // I.E.T. – 1966. – Vol.5. – P. 44–50. (in Russian)
10. Polishchuk V.N., Shevchenko N.G., Afanas'ev N.G., et al. Multi-channel counter for registration high-energy electrons: Preprint KIPT 72-40. – 1972. – Kharkov. – 20p. (in Russian)
11. Buki A.Yu., Shevchenko N.G., Nenko I.A., et al. Moments of the response functions of the  ${}^2\text{H}$  nucleus at  $q = 1.05 \text{ fm}^{-1}$  // Phys. of At. Nucl. – 2002. – Vol.65(5). – P. 787–796.
12. Buki A.Yu., Shevchenko N.G., Polishchuk V.N., Khomich A.A. Transverse moment of the  ${}^4\text{He}$  response function at transferred momentum  $0.75 \div 1.5 \text{ fm}^{-1}$  // Phys. of At. Nucl. – 1995. – Vol.58(8). – P. 1353–1361.
13. Buki A.Yu. Coulomb sum of  ${}^{12}\text{C}$  nucleus at transferred momentum  $0.95 \div 1.35 \text{ fm}^{-1}$  // The Journal of Kharkiv National University. Series: "Nuclei, Particles, Fields". – 2010. – Vol. 48. – P. 37–40. (in Russian)
14. Überall H. Electron Scattering From Complex Nuclei. Part A. - Academic Press: New York and London, 1971. (look page 368)
15. Krumova G.Z., Tomasi-Gustafsson E., Antonov A.N. Charge form factor and cluster structure of the  ${}^6\text{Li}$  nucleus // Open Phys. – 2008. – Vol.6. – P. 491–497. DOI: 10.2478/s11534-008-0091-4, arXiv:0709.1016v1 [nucl-th].

<sup>2/</sup> In particular, checking of  $x$  values for the nuclei of lithium isotopes.

PACS: 87.14.C++c, 87.16.Dg

## NOVEL CYANINE DYES AS POTENTIAL AMYLOID PROBES: A FLUORESCENCE STUDY

U. Tarabara<sup>1</sup>, K. Vus<sup>1</sup>, A. Kurutos<sup>2</sup>, O. Ryzhova<sup>1</sup>, V. Trusova<sup>1</sup>, G. Gorbenko<sup>1</sup>,  
N. Gadjev<sup>2</sup>, T. Deligeorgiev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Nuclear and Medical Physics, V.N. Karazin Kharkiv National University  
4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine

<sup>2</sup>Faculty of Chemistry and Pharmacy, Sofia University, "St. Kliment Ohridski", 1  
blv. J. Bourchier, Sofia, 1164, Bulgaria  
e-mail: [uliana.tarabara@gmail.com](mailto:uliana.tarabara@gmail.com)

Received February 22, 2018

The applicability of the novel heptamethine cyanine dyes AK7-5 and AK7-6 to the detection and characterization of one-dimensional protein aggregates (amyloid fibrils) associated with numerous pathologies has been evaluated using the method of fluorescence spectroscopy. It was found that both the monomeric and aggregated forms of these dyes can bind to amyloidogenic protein lysozyme, but the concomitant changes in the electronic structure of H-aggregates render them capable of fluorescing. The growth of the hypsochromic bands with negligible changes of the monomeric peaks induced by the native protein and the opposite effects induced by the lysozyme fibrils suggest that the native lysozyme has more binding sites for the dye aggregates than fibrillar protein, while the fibril grooves represent specific binding site for the dyes monomers. The observed spectral behavior of the cyanine dyes, viz. significant distinctions in the fluorescence responses produced by the monomeric and fibrillar forms of lysozyme, suggest the possibility of recruiting these compounds as fluorescent amyloid markers along with the classical amyloid marker Thioflavin T.

**KEYWORDS:** Heptamethine cyanine dyes, amyloid marker, H-aggregates, fluorescence, lysozyme, amyloid fibrils

## НОВІ ЦІАНИНОВІ БАРВНИКИ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ АМІЛОЇДНІ ЗОНДИ: ФЛУОРЕСЦЕНТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ

У. Тарабара<sup>1</sup>, К. Вус<sup>1</sup>, А. Куротос<sup>1</sup>, О. Рижова<sup>1</sup>, В. Трусова<sup>1</sup>, Г. Горбенко<sup>1</sup>, Н. Гаджев<sup>2</sup>, Т. Делігеоргієв<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Кафедра ядерної та медичної фізики, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
пл. Свободи 4, Харків, 61022, Україна

<sup>2</sup>Факультет хімії і фармації, Софійський університет, Софія, 1164, Болгарія

За допомогою методу флуоресцентної спектроскопії проведена оцінка можливості використання нових гептаметинових ціанинових барвників АК7-5 та АК7-6 для детектування і характеристики одномірних білкових агрегатів (амілоїдних фібрил), пов'язаних із розвитком численних патологій. Показано, що мономерна та агрегована форми цих барвників можуть зв'язуватись з амілоїдогенним білком лізоцимом, а супутні зміни в електронній структурі Н-агрегатів надають їм здатності флуоресцювати. Зростання гіпсохромної смуги, поряд з незначними змінами мономерного піка, індуковані нативним білком, і протилежні ефекти, викликані фібрилами лізоциму, дозволяють припустити, що нативний лізоцим має більшу кількість сайтів зв'язування для агрегатів барвника, ніж фібрилярна форма білка, в той час як жолобки фібрил являють собою специфічні сайти зв'язування для мономерів барвника. Спостережувана спектральна поведінка ціанинів, а саме значні відмінності флуоресцентних відповідей, що викликані мономерною та фібрилярною формами лізоциму, свідчать про можливість застосування цих сполук в якості флуоресцентних амілоїдних маркерів, поряд з класичним маркером Тіофлавіном Т.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** Гептаметинові ціанинові барвники, амілоїдний маркер, Н-агрегати, флуоресценція, лізоцим, амілоїдні фібрили

## НОВЫЕ ЦИАНИНОВЫЕ КРАСИТЕЛИ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АМИЛОИДНЫЕ ЗОНДЫ: ФЛУОРЕСЦЕНТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

У. Тарабара<sup>1</sup>, Е. Вус<sup>1</sup>, А. Куротос<sup>1</sup>, О. Рыжова<sup>1</sup>, В. Трусова<sup>1</sup>, Г. Горбенко<sup>1</sup>, Н. Гаджев<sup>2</sup>, Т. Делігеоргієв<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Кафедра ядерной и медицинской физики, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
пл. Свободы 4, Харьков, 61022, Украина

<sup>2</sup>Факультет химии и фармации, Софийский университет, София, 1164, Болгария

С помощью метода флуоресцентной спектроскопии проведена оценка возможности использования новых гептаметиновых цианиновых красителей АК7-5 и АК7-6 для детектирования и характеристики одномерных белковых агрегатов (амилоидных фибрилл), связанных с развитием множества патологий. Показано, что мономерная и агрегированная формы этих красителей могут связываться с амилоидогенным белком лизоцимом, а сопутствующие изменения в электронной структуре Н-агрегатов делают их способными флуоресцировать. Рост гипсохромной полосы, наряду с незначительными изменениями мономерного пика, индуцируемые нативным белком, и противоположные эффекты, вызванные фибриллами лизоцима, позволяют предположить, что нативный лизоцим обладает большим количеством сайтов связывания для агрегатов красителя, чем фибриллярная форма белка, в то время как жолобки фибрилл представляют собой специфические сайты связывания для мономеров красителя. Наблюдаемое спектральное поведение цианинов, а именно значительные различия флуоресцентных ответов, вызванных мономерной и фибриллярной формами лизоцима, свидетельствует о возможности применения этих соединений в качестве флуоресцентных амилоидных маркеров, наряду с классическим маркером Тіофлавіном Т.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** Гептаметиновые цианиновые красители, амилоидный маркер, H-агрегаты, флуоресценция, лизоцим, амилоидные фибриллы

The accumulation of the highly ordered protein aggregates, amyloid fibrils, in various tissues and organs is associated with a variety of human diseases, including Alzheimer's, Parkinson's disease, systemic amyloidosis, type II diabetes, etc [1]. Amyloid fibrils represent highly ordered one-dimensional protein aggregates up to several micrometers in length and several nanometers in width, consisting of cross- $\beta$ -structure core, in which  $\beta$ -sheets are oriented along the long axis of fibril [2-4]. One of the most powerful approaches to the detection of amyloid fibrils is based on the use of fluorescent dyes [5]. The classical amyloid markers are Thioflavin T and Congo Red [6-10], whose association with  $\beta$ -sheet structure of amyloid fibrils is accompanied by a substantial increase of fluorescence intensity and significant shifts in the absorption, fluorescence and excitation spectra [11-13]. Nevertheless, these well-known dyes have some drawbacks, among which are low result reproducibility and poor specificity to amyloid fibrils, the propensity for binding to  $\alpha$ -helical polypeptide fragments, etc. [14,15]. In view of this, extensive research efforts are currently focused on looking for the more effective amyloid-specific fluorophores.

Near-infrared (NIR) cyanine dyes, a wide class of organic molecules with unique photophysical properties, such as high extinction coefficients, high fluorescence quantum yield and long-wavelength absorption and fluorescence maxima [16-18]. They have found numerous applications in different areas including optoelectronics, laser technologies, bioanalytics, photoelectrochemistry, etc. [19-22]. Due to their advantageous spectral characteristics cyanines have been employed in biomedical research and diagnostics as non-covalent labels for detection of proteins, nucleic acids, lipids and strong oxidizing agents [23-27]. Remarkably, cyanine dyes have been also successfully applied to the identification of amyloid fibrils and inhibition of their growth [28-32]. The advantages of these compounds over the classical amyloid marker Thioflavin T are fluorescence and absorption in the NIR region, high reproducibility of the results and more pronounced changes in fluorescence and absorption spectra upon fibril binding [33].

Most cyanine dyes are known to aggregate in an aqueous solution and show the changes in the emission and absorption spectra with respect to the monomeric species. These assemblies are stabilized by van der Waals, H-bonding, hydrophobic, electrostatic, steric and stacking intermolecular interactions [34,35]. The aggregates that exhibit hypsochromically shifted band (H-band) in their absorption/emission spectrum are called H-aggregates, while J-aggregates display bathochromic shift relative to the monomer band [36]. This behavior was explained by the exciton theory, that considers the individual dye molecule as a point dipole [37]. In the first approximation, taking up only two dye molecules, the interaction between their transition dipoles splits the exciton state of the aggregate into two levels [38]. H-dimers with sandwich-type arrangement (or plane-to-plane stacking) during self-assembly transit to an upper energy level, resulting in the short-wavelength shift of the absorption maximum. The head-to-tail arrangement (end-to-end stacking) of J-dimers is coupled with the transition into lower state with respect to the monomer species, thus exhibiting the long-wavelength shifted absorption band. The structural packing of the dye molecules in the aggregate is described by the slippage angle  $\alpha$  defined as the angle between the direction of any one of the parallel molecules and long axis passing through the centers of the aggregated molecules. In particular, when  $\alpha = 90^\circ$  the molecules are in a parallel orientation, while when  $\alpha = 0^\circ$  a linear molecular orientation is observed [39]. In a general case, the slippage angles ranging from  $0^\circ$  to  $32^\circ$  correspond to J-aggregates, while the angles  $\{32^\circ-90^\circ\}$  are observed for H-aggregates [17].

The aim of the present study is to assess the amyloid-sensing propensity of the two newly synthesized near-infrared cyanine heptamethine dyes, AK7-5 and AK7-6. To this end, we compared the fluorescence responses of the examined dyes in the presence of the native and fibrillar lysozyme. Lysozyme is a well-characterized multifunctional protein with bactericidal, antitumor and immunomodulatory activities. The mutants of human lysozyme (I56T, F57I, W64R, D67H) are prone to pathological fibrillization implicated in the molecular etiology of familial nonneuropathic systemic amyloidosis, a disease affecting kidney, liver and spleen [40].

## EXPERIMENTAL SECTION

**Materials.** Hen egg white lysozyme (Lz) was obtained from Sigma (St. Louis, MO, USA). Cyanine probes AK7-5 and AK7-6 (Fig. 1) were synthesized in the University of Sofia, Bulgaria, as described previously [41]. Stock solutions of AK7-5 and AK7-6 were prepared by dissolving the dyes in dimethylsulfoxide (DMSO), then diluted by 5 mM sodium phosphate buffer (pH 7.4) and used for spectroscopic measurements. The concentration of the dyes was determined spectrophotometrically, using the extinction coefficients  $\varepsilon_{808}^{DMSO} = 0.197 \mu\text{M}^{-1}\text{cm}^{-1}$  and  $\varepsilon_{814}^{DMSO} = 0.209 \mu\text{M}^{-1}\text{cm}^{-1}$  for AK7-5 and AK7-6, respectively.

**Preparation of amyloid fibrils.** Amyloid fibrils were obtained from the egg yolk lysozyme by the protein incubation in 10 mM glycine buffer at pH 2 and 60 °C for 14 days [41]. Protein concentration in the stock solution was 10 mg/ml. The working solutions of the native and fibrillar lysozyme were prepared in 5 mM sodium phosphate buffer (pH 7.4). Hereafter, the native and fibrillar protein forms are designated as LzN and LzF, respectively.

**Fluorescence measurements.** Fluorescence spectra of AK7-5 and AK7-6 were recorded with the spectrofluorimeter Shimadzu RF-6000 (Japan) at 25 °C using 5 nm excitation and emission slit widths. The excitation and emission wavelengths are indicated in the legends to figures.

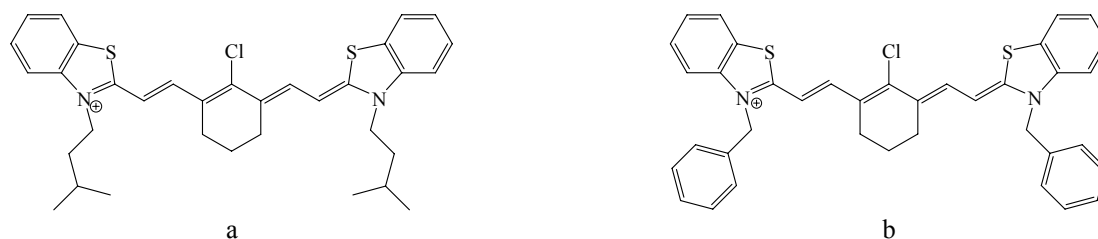


Fig. 1. Structures of the AK7-5 (a) and AK7-6 (b) dyes.

## RESULTS AND DISCUSSION

At the first step of study we analysed the emission and excitation spectra of AK7-5 and AK7-6 in an organic solvent and an aqueous solution. Recently, using the absorption spectroscopy technique we have found that both the above dyes can form non-fluorescing H-aggregates in an aqueous solution, but tend to disaggregate in the presence of protein [42]. In an organic solvent, DMSO, AK7-5 and AK7-6 monomers display fluorescence emission maxima at 835 and 839 nm, respectively, while fluorescence excitation maxima are observed at 816 nm for both dyes (Fig. 2). In the sodium-phosphate buffer solution the examined dyes have the emission maxima similar to DMSO, but there were no bands corresponding to H-dimers or H-aggregates, suggesting that such kinds of aggregates are non-fluorescent. Notably, this observation is in concert with the literature data [43].

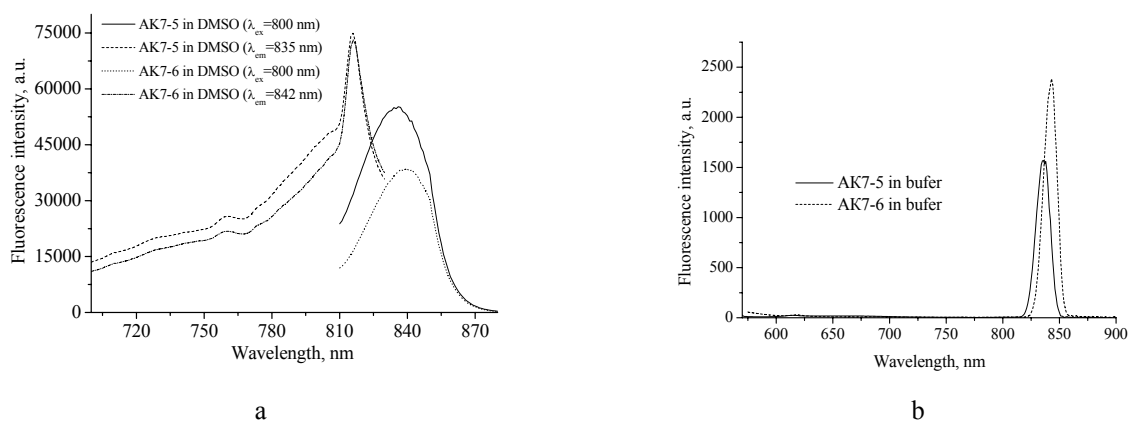


Fig. 2. Emission and excitation spectra of AK7-5 and AK7-6

a) in DMSO, b) in sodium-phosphate buffer. The concentrations of AK7-5 and AK7-6 were 14.4 and 9.8  $\mu\text{M}$ , respectively

The monomeric peaks of AK7-5 and AK7-6 gradually increased upon the dye titration with the native lysozyme, but above a certain protein concentration the fluorescence intensity reduced to a nearly initial level. This process was accompanied by the appearance of a hypsochromic band at 700 nm whose intensity increased with the protein concentration (Figs. 3a, 4a).

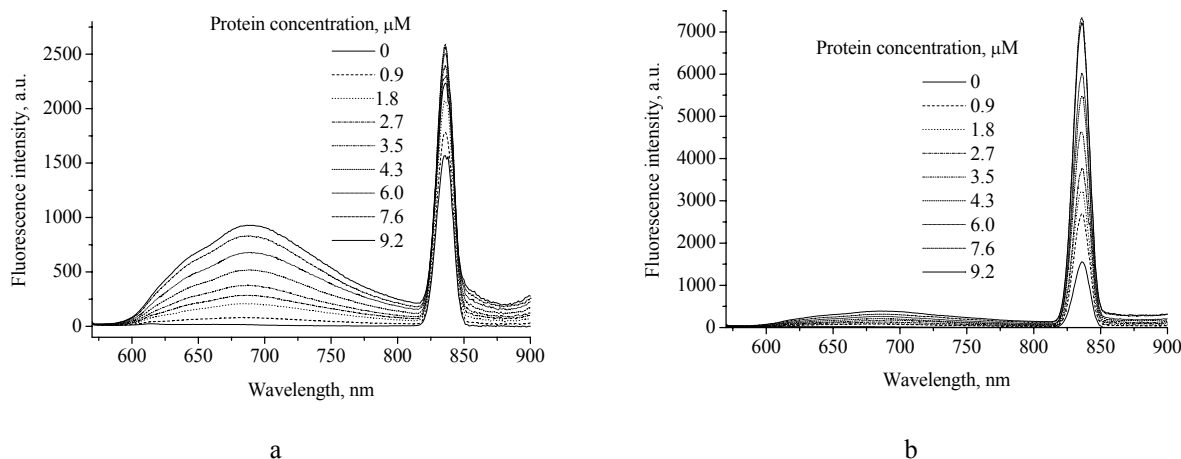


Fig. 3. Fluorescence spectra of AK7-5

a) at the increasing concentration of the native lysozyme, b) at the increasing concentration of fibrillar lysozyme  
The dye concentration was 14.4  $\mu\text{M}$ . The excitation wavelength was 557 nm.

In the presence of lysozyme fibrils, both heptamethine dyes demonstrated significant rise of monomeric bands (by a factor of 4.5/3 for AK7-5/AK7-6, respectively) without any decrease of the hypsochromic bands and their slight enhancement compared to the native protein (Figs 3b,4b).

By and large, the rise in the fluorescence intensity of monomer band can be caused by the two processes: i) the growth of the monomer concentration due to a shift of equilibrium between the different dye forms in the buffer after addition of the protein, as was previously demonstrated using absorption spectroscopy [42]; ii) increase of the dye quantum yield arising from its immobilization on the protein binding site. The interference between these processes complicates the quantitative analysis of the obtained results. Taking into account the absorption spectroscopy data [42] it can be assumed that the emission band of 600-800 nm corresponds to the H-dimers and H-aggregates of the examined dyes. This finding is especially interesting because, as mentioned above, in an aqueous media H-dimers and H-aggregates are commonly incapable of fluorescing. Allowing for this fact, it can be supposed that the binding of H-aggregates to the native or fibrillar protein is followed by the changes in the geometric characteristics and electronic structure of H-dimers and H-aggregates of cyanine dyes, thereby causing an increase in the fluorescence quantum yield.

Remarkably, such an unexpected fluorescence was previously observed for the H-aggregates of thiazole orange and merocyanine dyes [44,45]. It is also noteworthy that the intensity of this hypsochromic band in the presence of the native protein was 1.5 - 2.5-fold higher compared to the lysozyme fibrils.

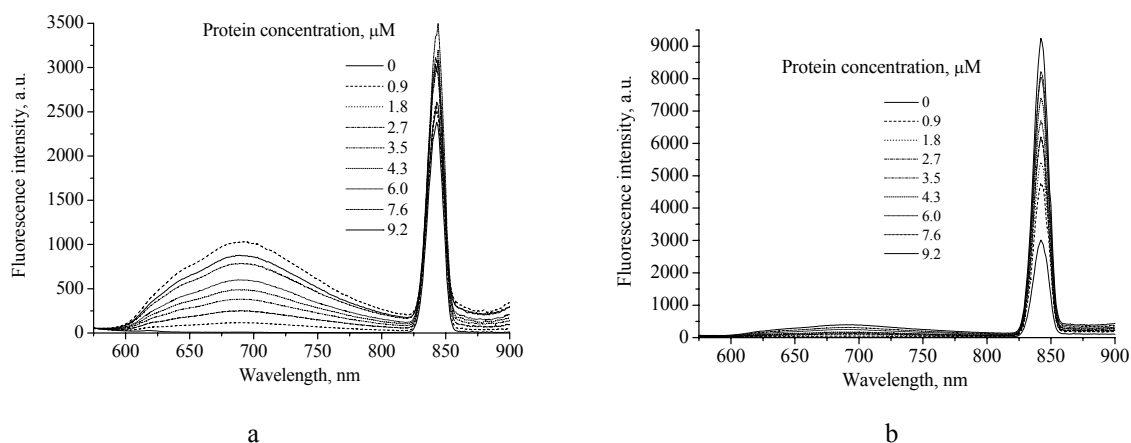


Fig. 4. Fluorescence spectra of AK7-6  
a) at the increasing concentration of the native lysozyme, b) at the increasing concentration of fibrillar lysozyme  
The dye concentration was 4.9  $\mu\text{M}$ . The excitation wavelength was 561 nm.

Qualitatively, this finding can be rationalized by: i) the formation of the complexes “monomer-protein”, “dimer-protein”, “H-aggregate-protein” shifting the monomer-aggregate equilibrium; ii) the binding of the dye monomers, H-dimers and H-aggregates to the native and fibrillar lysozyme manifesting itself in the changes in the fluorescence spectra. The fact that the more significant increase of the hypsochromic band 600-800 nm was found for LzN, suggest that the native protein has more binding sites for cyanine aggregates than LzF. Presumably, the hydrophobic, electrostatic, and van der Waals interactions between the dye monomers and the native protein promote the formation of the dye dimers and H-aggregates. The electrostatic interactions between the positively charged molecules of AK7-5/AK7-6 and negatively charged lysozyme cavities increase the dye-protein affinity. At the same time, despite the LzF has more exposed hydrophobic residues compared to LzN, the contribution of hydrophobic interactions to the formation of the complexes “H-dimer-protein” and “H-aggregate-protein” is less than that of electrostatic forces. It can also be noted that LzF produced a significant increase in the monomeric peak and much less pronounced rise in the peak at 700 nm compared to LzN. The observed substantial fluorescence increase at 840 nm can be regarded as an unambiguous proof of specific binding of the dye monomers to lysozyme fibrils.

## CONCLUSIONS

- Both the monomeric and aggregated forms of the novel heptamethine cyanines, AK7-5 and AK7-6, can bind to lysozyme, but the concomitant changes in the electronic structure of H-aggregates render them capable of fluorescing. The growth of the hypsochromic bands with negligible changes of the monomeric peaks induced by the native protein and the opposite effects brought about by the lysozyme fibrils suggest that the native lysozyme has more binding sites for the dye aggregates than fibrillar protein, while the fibril grooves represent specific binding site for the dyes monomers.
- The changes of the monomer band observed in the presence of the native lysozyme is indicative of the disassembly of the H-aggregates in solution followed by their assembly with presumably modified properties on the protein surface. At the same time, the fluorescence intensity of monomeric dyes gradually increases with the concentration of lysozyme fibrils without any re-assembly of the H-aggregates within the fibril structure.

- Cumulatively, the revealed spectral behavior of the cyanine dyes, viz. significant distinctions in the fluorescence spectra in the presence of monomeric and fibrillar forms of lysozyme, point to the possibility of using these compounds as fluorescent amyloid markers along with the classical amyloid marker Thioflavin T.

#### ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported by the grant № 0116U000937 for Young Scientists from the Ministry of Science and Education of Ukraine.

#### REFERENCES

1. Dobson C. M. The Amyloid Phenomenon and Its Links with Human Disease // *Cold Spring Harb Perspect Bio* 2017. – Vol. 9. – P. 1-14.
2. Rochet J.C., Lansbury P.T.Jr. Amyloid fibrillogenesis: themes and variations // *Curr. Opin. Struct. Biol.* – 2000. – Vol.10. – P. 60-68.
3. Nelson R. Eisenberg D. Recent atomic models of amyloid fibril structure // *Adv. Protein Chem.* – 2006. – Vol. 73. – P. 235–282.
4. Adamcik J. Mezzenga R. Proteins Fibrils from a Polymer Physics Perspective // *Macromolecules.* – 2012. – Vol. 45. – P. 1137–1150.
5. Groenning M. Binding mode of Thioflavin T and other molecular probes in the context of amyloid fibrils—current status // *J. Chem. Biol.* – 2010. – Vol. 3. – P. 1–18.
6. LeVine H. 3rd. Thioflavine T interaction with synthetic Alzheimer's disease beta\_amyloid peptides: detection of amyloid aggregation in solution // *Protein Sci.* – 1993. – Vol. 2. – P. 404-410.
7. Klunk W.E., Pettegrew J.W., Abraham D.J. Quantitative evaluation of Congo Red binding to amyloid-like proteins with a beta\_ pleated sheet conformation // *J. Histochem. Cytochem.* – 1989. – Vol. 37. – P. 1273-1281.
8. Naiki H., Higuchi K., Hosokawa M., Takeda T. Fluorometric determination of amyloid fibrils in vitro using the fluorescent dye, thioflavin T1 // *Anal. Biochem.* – 1989. – Vol. 177. – P. 244-249.
9. Westermark G.T., Johnson K.H., Westermark P. Staining methods for identification of amyloid in tissue // *Methods Enzymol.* – 1999. – Vol. 309. – P. 3-25.
10. Glenner G.G., Page D.L., Eanes E.D. The relation of the properties of congo red-stained amyloid fibrils to the  $\beta$ -conformation // *J. Histochem. Cytochem.* – 1972. – Vol. 20. – P. 821-826.
11. Vus K., Trusova V., Gorbenko G., Sood R., Kinnunen P. ThioflavinT derivatives for the characterization of insulin and lysozyme amyloid fibrils in vitro: fluorescence and quantum-chemical studies // *J. Luminesc.* – 2015. – Vol. 159. – P. 284–293.
12. LeVine H. 3rd. Thioflavine T interaction with synthetic Alzheimer's disease beta-amyloid peptides: detection of amyloid aggregation in solution // *Protein Sci.* – 199. – Vol. 2. – P. 404-410.
13. Nilsson M.R. Techniques to study amyloid fibril formation in vitro // *Methods.* – 2004. – Vol. 34. – P. 151–160.
14. Murakami K., Irie K., Morimoto A., Ohigashi H., Shindo M., Nagao M., Shimizu T. and Shirasawa T. Neurotoxicity and physicochemical properties of A $\beta$  mutant peptides from cerebral amyloid angiopathy: implication for the pathogenesis of cerebral amyloid angiopathy and Alzheimer's disease // *J. Biol. Chem.* – 2003. – Vol. 278. – P. 46179-46187.
15. Khurana R., Uversky V.N., Nielsen L., Fink A.L. Is Congo red an amyloid\_specific dye? // *J. Biol. Chem.* – 2001. – Vol. 276. – P. 22715-22721.
16. Gadjev N. I., Deligeorgiev T. G. Kim S. H. Preparation of monomethine cyanine dyes as noncovalent labels for nucleic acids // *Dyes Pigm.* – 1999. – Vol. 40. – P. 181–186.
17. Waggoner A.S., Wang C.H., Tolles R.L. Mechanism of potential-dependent light absorption changes of lipid bilayer membranes in the presence of cyanine and oxonol dyes // *J. Membr. Biol.* – 1977. – Vol. 33. – P. 109-140.
18. Patonay G., Kim J.S., Kodagahally R., Strekowski L. Spectroscopic study of a novel bis(heptamethine cyanine) dye and its interaction with human serum albumin // *Appl. Spectrosc.* – 2005. – Vol. 59. – P. 682–690.
19. Kurutos A., Ryzhova O., Trusova V., Tarabara U., Gorbenko G., Gadjev N., Deligeorgiev T. Novel asymmetric monomethine cyanine dyes derived from sulfobetaine benzothiazolium moiety as potential fluorescent dyes for non-covalent labeling of DNA // *Dyes and Pigments.* – 2016. – Vol. 130. – P. 122-128.
20. Fabian J., Nakazumi H., Matsuoka M. Near-infrared absorbing dyes // *Chem. Rev.* – 1992. – Vol. 92. – P. 1197–1226.
21. Berlepsch H., Brandenburg E., Koksche B., BoEttcher Peptide adsorption to cyanine dye aggregates revealed by cryo-transmission electron microscopy // *C. Langmuir.* – 2010. – Vol. 26. – P. 11452–11460.
22. Guo M., Diao P., Ren Y.-J., Meng F., Tian H., Cai S.-M. Photoelectrochemical studies of nanocrystalline TiO<sub>2</sub> co-sensitized by novel cyanine dyes // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* – 2005. – Vol. 88. – P. 33–35.
23. Welder F., Paul B., Nakazumi H., Yagi S., Colyer C. L. Symmetric and asymmetric squarylium dyes as noncovalent protein labels: a study by fluorimetry and capillary electrophoresis // *J. Chromatogr. B: Anal. Technol. Biomed. Life Sci.* – 2003. – Vol. 793. – P. 93–105.
24. Yarmoluk S.M., Kovalska V.B., Volkova K.D. Optimized dyes for protein and nucleic acid detection // *Adv. Fluor. Report. Chem. Biol. III.* – 2011. – Vol. 113. – P. 161–199.
25. Mishra A., Behera R.K., Behera P.K., Mishra B.K., Behera G.B. Cyanines during the 1990s: a review // *Chem. Rev.* – 2000. – Vol. 100. – P. 1973–2011.
26. Lou Z., Li P., Han K. Redox-responsive fluorescent probes with different design strategies // *Acc. Chem. Res.* – 2015. – Vol. 48. – P. 1358-1368.
27. Yu F., Li P., Li G., Zhao G., Chu T., Han K. A near-IR reversible fluorescent probe modulated by selenium for monitoring peroxynitrite and imaging in living cells // *J. Am. Chem. Soc.* – 2011. – Vol. 133. – P. 11030–11033.
28. Sabate R., Estelrich Pinacyanol as effective probe of fibrillar  $\beta$  - amyloid peptide: Comparative study with Congo Red // *J. Biopolymers.* – 2003. – Vol. 72. – P. 455–463.

29. Volkova K.D., Kovalska V.B., Balanda A.O., Losytskyy M.Y., Golub A.G., Vermeij R.J., Subramaniam V., Tolmachev O.I., Yarmoluk S.M. Specific fluorescent detection of fibrillar  $\alpha$ -synuclein using mono- and trimethine cyanine dyes // *Bioorg. Med. Chem.* – 2008. – Vol. 16. – P. 1452–1459.
30. Chegaev K., Federico A., Marini E., Rolando B., Fruttero R., Morbin M., Rossi G., Fugnanesi V., Bastone A., Salmona M., Badiola N.B., Gasparini L., Cocco S., Ripoli C., Grassi C., Gasco A. NO-donor thiocarbocyanines as multifunctional agents for Alzheimer's disease // *Bioorg. Med. Chem.* – 2015. – Vol. 23. – P. 4688–4698.
31. Volkova K.D., Kovalska V.B., Inshin D., Slominskii Y.L., Tolmachev O.I., Yarmoluk S.M. Novel fluorescent trimethine cyanine dye 7519 for amyloid fibril inhibition assay // *Biotech. Histochem.* – 2011. – Vol. – P. 86, 188–191.
32. Yang W., Wong Y., Ng O.T.W., Bai B.L.-P., Kwong D.W.J., Ke Y., Jiang Z.-H., Li H.-W., Yung K.L.K., Wong M.S. Novel fluorescent trimethine cyanine dye 7519 for amyloid fibril inhibition assay // *Angew. Chem., Int. Ed.* – 2012. – Vol. 51. – P. 1804–1810.
33. Kovalska V.B., Losytskyy M.Y., Tolmachev O.I., Slominskii Y.L., Segers-Nolten G.M., Subramaniam V., Yarmoluk S.M. Tri- and pentamethine cyanine dyes for fluorescent detection of  $\alpha$ -synuclein oligomeric aggregates // *J. Fluoresc.* – 2012. – Vol. 22. – P. 1441–1448.
34. Johansson M.K., Fidder H., Dick D., Cook R.M. Intramolecular dimers: a new strategy to fluorescence quenching in dual-labeled oligonucleotide probes // *J. Am. Chem. Soc.* – 2002. – Vol. 124. – P. 6950–6956.
35. Khairutdinov R.F., Serpone N. Photophysics of cyanine dyes: Subnanosecond relaxation dynamics in monomers, dimers, and H- and J-aggregates in solution // *J. Phys. Chem. B.* – 1997. – Vol. 101. – P. 2602–2610.
36. Eisfeld A., Briggs K.J.S. The J- and H-bands of organic dye aggregates // *Chem. Phys.* – 2006. – Vol. 324. – P. 376–384.
37. Kasha M., Rawls H.R., Ashraf El-Bayoumi M. The exciton model in molecular spectroscopy // *Pure Appl. Chem.* – 1965. – Vol. 11. – P. 371–392.
38. Kim J.S., Kodagahally R., Strekowski L., Patonay G. A study of intramolecular H-complexes of novel bis (heptamethine cyanine) dyes // *Talanta.* – 2005. – Vol. 67. – P. 947–954.
39. Ishchenko A.A. Structure and spectral-luminescent properties of polymethine dyes // *Russ. Chem. Rev.* – 1991. – Vol. 60. – P. 865–884.
40. Dumoulin M., Canet D., Last A.M., Pardon E., Archer D.B., Muyldermans S., Wyns L., Matagne A., Robinson C.V., Redfield C., Dobson C.M. Reduced Global Cooperativity is a Common Feature Underlying the Amyloidogenicity of Pathogenic Lysozyme Mutations // *J. Mol. Biol.* – 2005. – Vol. 346. – P. 773–788
41. Kurutos A., Ryzhova O., Tarabara U., Trusova V., Gorbenko G., Gadjev N., Deligeorgiev T. Novel synthetic approach to near-infrared heptamethine cyanine dyes and spectroscopic characterization in presence of biological molecules // *J. Photochem. Photobiol., A.* – 2016. – Vol. 328. – P. 87–96.
42. Vus K., Tarabara U., Kurutos A., Ryzhova O., Gorbenko G., Trusova V., Gadjev N., Deligeorgiev T. Aggregation behavior of novel heptamethine cyanine dyes upon their binding to native and fibrillar lysozyme // *Mol. BioSyst.* – 2017. – Vol. 13. – P. 970–980.
43. Beckford G., Owens E.A., Henary M.M., Patonay G. The solvatochromic effects of side chain substitution on the binding interaction of novel tricarbocyanine dyes with human serum albumin // *Talanta.* – 2012. – Vol. 92. – P. 45–52.
44. Lau V., Heyne B. Calix[4]arene sulfonate as a template for forming fluorescent thiazole orange H-aggregates // *Chem. Commun.* – 2010. – Vol. 46. – P. 3595–3597.
45. Rosch U., Yao S., Wortmann R., Wurthner F. Fluorescent H-aggregates of merocyanine dyes // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2006. – Vol. 45. – P. 7026–7030.

PACS: 87.14.Cc, 87.16.Dg

**MODELIZATION OF AMYLOID FIBRIL SELF-ASSEMBLY****V. Trusova, G. Gorbenko***Department of Nuclear and Medical Physics, V.N. Karazin Kharkiv National University**4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine**E-mail: valerija.trusova@karazin.ua*

Received February 22, 2018

Intermolecular noncovalent interactions between protein molecules result in the formation of a wide spectrum of supramolecular assemblies the structure of which varies from disordered amorphous aggregates to the crystals with strictly defined translational symmetry in three directions. One-dimensional protein aggregates (amyloid fibrils) represent highly ordered semiflexible polymers with unique mesoscopic properties which can be tuned by both intrinsic physicochemical characteristics of polypeptide chain and milieu conditions. In the present work the molecular mechanisms of amyloid formation are discussed and mathematical description of the existing models of protein fibrillization are given. For disease-related amyloids, deeper understanding of fibril growth process may shed light on the pathogenesis and molecular mechanisms of the disorders, as well as on the strategies of amyloidosis prevention at atomistic level. In the context of nanotechnology and functional material science, knowing the details of amyloid formation is crucially required for the design of novel nanomaterials with unprecedented qualities.

**KEYWORDS:** amyloid fibrils, misfolding, mathematical models, amyloid diseases, nanomaterials**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ САМОЗБИРАННЯ АМІЛОЇДНИХ ФІБРИЛ****В. Трусова, Г. Горбенко***Кафедра ядерної та медичної фізики, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна**пл. Свободи 4, Харків, 61022, Україна*

Міжмолекулярні нековалентні взаємодії між білковими молекулами призводять до формування широкого спектру надмолекулярних ансамблів, структура яких коливається від неупорядкованих аморфних агрегатів до кристалів із чітко визначеною трансляційною симетрією у трьох напрямках. Одномірні білкові агрегати (амілоїдні фібрили) представляють собою високопорядковані напівгнучкі полімери з унікальними мезоскопічними властивостями, що визначаються як внутрішніми фізико-хімічними характеристиками поліпептидного ланцюга, так і зовнішніми умовами. У даній роботі обговорюються молекулярні механізми утворення амілоїдів, а також наведено математичний опис існуючих на сьогодні моделей фібрилізації білків. Для амілоїдів, які пов'язані із різноманітними патологіями, розуміння процесу росту фібрил може пролити світло на патогенез та молекулярні механізми амілоїдних захворювань, а також на стратегії попередження амілоїдозу на атомістичному рівні. У контексті нанотехнологій та функціональних матеріалів, розуміння деталей утворення амілоїдів необхідне для дизайну нових наноматеріалів із перспективними властивостями.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** амілоїдні фібрили, місфолдінг, математичні моделі, амілоїдні захворювання, наноматеріали**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОСБОРКИ АМИЛОИДНЫХ ФИБРИЛЛ****В. Трусова, Г. Горбенко***Кафедра ядерной и медицинской физики, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина**пл. Свободы 4, Харьков, 61022, Украина*

Межмолекулярные нековалентные взаимодействия между белковыми молекулами приводят к формированию широкого спектра надмолекулярных ансамблей, структура которых колеблется от неупорядоченных аморфных агрегатов до кристаллов с четко определенной трансляционной симметрией в трех направлениях. Одномерные белковые агрегаты (амилоидные фибриллы) представляют собой высокоупорядоченные полугибкие полимеры, с уникальными мезоскопическими свойствами, которые определяются как внутренними физико-химическими характеристиками полипептидной цепи, так и внешними условиями. В данной работе обсуждаются молекулярные механизмы образования амилоидов, а также приведено математическое описание существующих на сегодняшний день моделей фибриллизации белков. Для амилоидов, связанных с различными патологиями, понимание процесса роста фибрилл может пролить свет на патогенез и молекулярные механизмы амилоидных заболеваний, а также на стратегии предупреждения амилоидоза на атомистическом уровне. В контексте нанотехнологий и функциональных материалов, понимание деталей образования амилоидов необходимо для дизайна новых наноматериалов с перспективными свойствами.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** амилоидные фибриллы, мисфолдинг, математические модели, амилоидные заболевания, наноматериалы

The aggregation of specific peptides and proteins into highly ordered  $\beta$ -sheet fibrillar structures, termed amyloid fibrils, plays a crucial role in the onset and progression of a number of amyloid-related pathologies including Alzheimer's, Parkinson's and Huntington's diseases, type II diabetes, rheumatoid arthritis, spongiform encephalopathies, etc. [1,2]. The impairment of cell functions by fibrillized proteins and their intermediates is causatively linked to the complex conformational behavior of these aggregates, which are distinguished by the presence of a core cross- $\beta$ -sheet structure with  $\beta$ -strands orienting perpendicularly to the fibril long axis and  $\beta$ -sheets propagating in its direction. Such molecular architecture is stabilized by the main-chain hydrogen bonding, ionic pairing, van der



Waals, aromatic  $\pi$ - $\pi$  interactions and hydrogen bonds between amino-acid side chains, with a central role in self-assembly propensity being played by protein hydrophobicity. Along with pathogenic activities, amyloid fibrils display superior physical and structural properties that render them the ideal candidates for the design of novel functional materials for various applications. Specifically, protein fibers were successfully used for constructing the nanowires, as scaffolds for tissue engineering, depot for drug transport, just to name a few [3-5].

In the light of versatility of amyloid phenomena, the understanding of the pathways of fibril formation is of utmost importance both from the viewpoint of combating the amyloid disorders and smart design of novel functional materials. The aim of the present contribution is to analyze the molecular basis for protein fibrillization, and overview some mathematical models proposed to describe the process of amyloid formation.

### MOLECULAR BASIS FOR FIRILLIZATION

For a long time the ability to form amyloid fibrils was attributed only to several proteins and peptides involved in the development of neurodegenerative diseases. However, continuously growing evidence supports the idea that a propensity to convert into fibrillar aggregates represents a generic property of polypeptide chain. The molecular basis for this process lies in the incorrect protein folding or misfolding.

In general, under physiological conditions, polypeptide chain reaches its native functional state through the folding pathways. The process of protein folding is commonly described by the principle of minimal frustration [6]. According to this principle, interdependent interactions between the side chains of amino acid residues cooperatively lead to the most stable low-energy structure which thus “minimally frustrated” [7]. This results in the funnel-shaped energy landscape of a protein molecule, described by an energy function  $F(x) = F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , where  $n$  denotes protein degrees of freedom,  $x_1, x_2, \dots, x_n$  specify microscopic state of the molecule (for instance, dihedral angles of polypeptide chain),  $F(x)$  is defined as protein free energy in a given conformation. The most thermodynamically stable protein conformation corresponds to the set of  $x_1, x_2, \dots, x_n$  values that yields the minimum value of  $F(x)$ . The funnel shape of the energy landscape predicts that the free energy decreases while approaching the native state (Figure). The wide top of the funnel represents the denatured, or unfolded states of a protein, while narrow bottom represents the global minimum of  $F(x)$ .

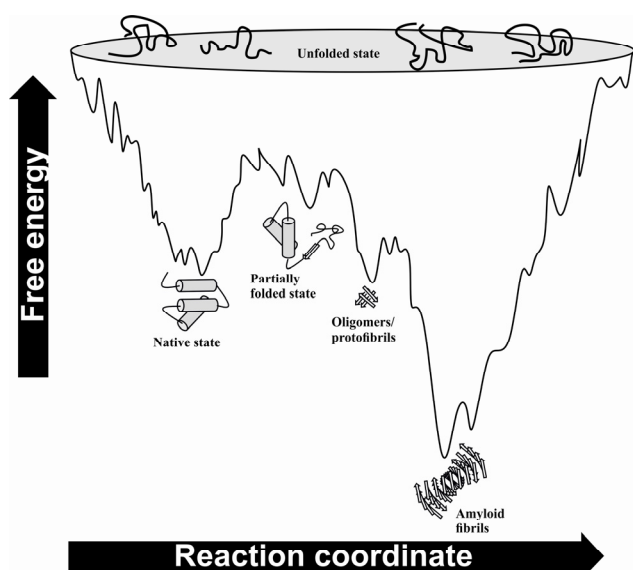


Figure. Energy funnel landscape of protein molecules.

However, due to high conformational freedom and fluctuations, the funnel energy landscape of every protein molecule is rugged, displaying several additional local minima on the energy surface. This implies that at each step of the folding process, protein molecule is in an equilibrium with partially folded intermediates, reducing thereby the probability of a polypeptide chain to reach its native state. The number and activity of such intermediates are controlled by polypeptide sequence and environmental conditions. These intermediate states generally have the exposed patches of hydrophobic amino acid residues which are prone to self-association. Hydrophobic interactions between partially folded states force the polypeptide chain to leave the native folding pathway and enter the off-folding route. Contrary to spontaneous and rapid folding process, the off-folding route is characterized by relatively slow kinetics. One of the possible off-folding pathways involves the transition of partially unfolded intermediates into the highly

ordered fibrillar structures, amyloid fibers [8]. These misfolded protein states are characterized predominantly by  $\beta$ -sheet secondary structure. The factors, which shift the balance between the intramolecular forces accounting for correct protein packing, and trigger the off-folding transformation into the ordered amyloid self-assemblies, involve genetic mutations, oxidative stress, physicochemical properties of the solvent (pH, temperature, ionic strength, pressure), etc.

### INTERMOLECULAR FORCES STABILIZING THE AMYLOID FIBRIL STRUCTURE

Modern models of amyloid fibers strongly highlight the fact that it is the hierarchical architecture that governs the physical properties of these aggregates. Extraordinary stability of the amyloids and their resistance to high hydrostatic pressures and temperatures suggest that fibrillar structure represents a free energy state lower than that of a native protein. Amyloid aggregates are stabilized by a set of interactions including hydrogen bonding, hydrophobic,

electrostatic, and aromatic  $\pi$ - $\pi$  interactions. The central role in self-assembly propensity is played by protein hydrophobicity [9,10].

A network of hydrogen-bonds acts like a molecular skeleton which holds the overall fibrillar architecture. Analogously to the folding of globular proteins, self-assembly of protein monomers into amyloid structures is essentially driven by hydrophobic effect. Hydrophobic collapse of polypeptide chain into a molten globule state, provoked the factors such as elevated protein concentration, temperature, pH and ionic strength of the solution, initiates the nucleation process [11,12]. The non-polar residues exposed during the protein unfolding attract to each other in order to minimize the unfavorable contacts with solvent. The mature fibrils, as well as the transient oligomeric intermediates, are stabilized by a network of hydrogen bonds along the amide backbone. A wealth of experimental results supports the idea that increase in sequence hydrophobicity accelerates the rate of fibrillization and enhances the thermodynamic stability of the resulting cluster [9,10]. A specific subclass of hydrophobic interactions, namely aromatic contacts was also proposed to contribute to the thermodynamic stabilization of the fibrils, but to a lesser extent. While Marek et al. concluded that  $\pi$ - $\pi$  interactions are kinetically important only during the lag phase of fibril formation [13], Gazit postulated that the role of aromatic interactions is two-fold: i) they provide positive energetic contribution arising from the  $\pi$ - $\pi$  stacking itself, and ii) their specific directional effect orients properly the  $\beta$ -strands to stack into a highly ordered structure [14].

Due to polyelectrolytic nature of the polypeptide chain, in the following it is tempting to briefly overview the role of electrostatics in the amyloid stability. The overall protein electrostatic potential, leading to the intra- and interchain repulsion, in couple with the unbalanced charges on N- and C-termini of the chain, result in the fact that under physiological conditions proteins are unable to self-assembly. However, once the protein is transferred into the conditions of Debye screening of the unfavorable repulsions between the residues (low pH and high ionic strength), the process of fibrillization is initiated. In addition, using the approach of capped peptide ends, the important role of electrostatic attraction between the charged termini in the lateral end-to-end association of the protofilaments has been revealed [15]. Likewise, several lines of evidence indicate that the role of electrostatics in amyloid formation lies in stabilization of the amyloid charged and polar segments as well as fibril turns by the formation the salt bridges between the side chain amino acid residues. Such salt bridges are typically of low energy and do not completely suppress the negative contribution of the net protein charge in the aggregation process. The formation of salt bridges in a fibrillar state was observed, for example, for apolipoprotein A-I fragment [16], prion protein [17], and A $\beta$  peptide [18].

### MOLECULAR MODELS FOR AMYLOID FORMATION

Accumulating experimental and theoretical evidence indicates that protein fibrillization is an extremely complex process characterized by several more or less clearly distinguished stages. Furthermore, the existence of multiple amyloid polymorphs, along with a variety of structural intermediates, strongly suggests that assembly of highly ordered protein aggregates may occur via different mechanisms. A great deal of models have been proposed to describe the amyloid formation [19-23].

The pioneering work concerning the protein polymerization belongs to Oosawa et al., who in 1959 investigated the aggregation of G-actin to F-actin [20]. In 1967 Griffith proposed the mechanistic template-assembly (TA) model to describe self-replication of the prion disease agent scrapie [24]. TA model predicts the existence of two protein states, a stable soluble conformation (S), and assembly-competent state (A). The elongation of the amyloid fiber occurs via attachment of S monomers to the A-state nucleus. Next significant contribution to the field of protein aggregation was made by Ferrone and co-workers who in 1980 proposed the model for polymerization of sickle hemoglobin considering the so-called "homogeneous" and "heterogeneous" nucleation, where "heterogeneous" nucleation means that new polymers nucleate on the surface of existing ones [25].

Monomer-directed conversion (MDC) model was formulated for prion aggregation by Prusiner et al. in 1982 and further extended in 1991 [26]. This model suggests the pre-existence of S monomers in the A-state conformation, which subsequently associate with the soluble S-state monomers and eventually initiate their rate-determining conversion into reactive A-state form.

Following the work of Prusiner, in 1993 Lansbury et al. developed the nucleation-dependent polymerization (NDP) model [21]. Initially, it was proposed to explain the mechanisms of prion transmission and propagation, but nowadays this model represents one of the basic kinetic models of protein fibrillation. Within the framework of this model protein conversion into the amyloid state is described by biphasic kinetic profile with the lag and growth phases. The lag (or nucleation) phase involves the monomer self-assembly into the critical nucleus having the highest energy and thus being the most thermodynamically unstable state. This process is followed by the elongation of the nucleus via

attachment of the additional monomers eventually resulting in thermodynamically favorable process of exponential fibril growth. Notably, the nucleus formation represents the rate-limiting step for the entire fibrillization process. The kinetics of the lag phase can be controlled by the environmental conditions (pH, ionic strength, temperature), mutations and/or addition of the pre-aggregated species (template) to the solution (known as seeding effect).

Assuming that the nucleus is represented by 10-mer, and aggregates larger than 10-mer are treated as fibrils, the kinetic equations of NDP model may be written in a general form as [27]:

$$\frac{d[M_1]}{dt} = -k_1[M_1] \left( 2[M_1] + \sum_{j=2}^9 [M_j] \right) + k_2 \left( 2[M_2] + \sum_{j=3}^{10} [M_j] \right) - k_p[M_1][M_{10}] - k_p[M_1][P], \quad (1)$$

$$\frac{d[M_j]}{dt} k_1[M_1]([M_{j-1}] - [M_j]) - k_2([M_j] - [M_{j+1}]) \quad (j = 2 - 9), \quad (2)$$

$$\frac{d[M_{10}]}{dt} = k_1[M_1][M_9] - k_2[M_{10}] - k_p[M_1][M_{10}], \quad (3)$$

$$\frac{d[M_j]}{dt} = k_p[M_1]([M_{j-1}] - [M_j]) \quad (j = 11 \text{ to } N - 1), \quad (4)$$

$$\frac{d[M_N]}{dt} k_p[M_1][M_{N-1}], \quad (5)$$

where  $k_1$  and  $k_2$  are the rate constants for monomer attachment (nucleus growth) and dissociation;  $k_p$  is the rate constant for nucleus elongation;  $[M_j]$  is the concentration of  $n$ -mer;  $[P] = \sum_{j=11}^{N-1} [M_j]$  is the concentration of fibrils. The total concentration of fibril-forming monomers is given by:

$$[F] = \sum_{j=11}^N j[M_j]. \quad (6)$$

The rates of increasing the monomer and fibril concentrations over time can be expressed as:

$$\begin{aligned} \frac{d[F]}{dt} &= k_p[M_1][P] + 11k_p[M_1][M_{10}] \\ \frac{d[P]}{dt} &= k_p[M_1][M_{10}] \end{aligned} \quad (7)$$

Numerical solution of the above equations yields the rate constants and the degree of oligomerization ( $N$ ). Analysis of protein fibrillization in terms of NDP model allowed explaining the well-known sigmoidal shape of the time-course of protein aggregation.

Further development of fibrillization theory comes from Flyvbjerg et al. who in 1996 developed a model considering the subsequent monomer addition mechanism [22]. Based on the assumptions that i) there is only one route for protein aggregation, and ii) every particular step is connected with the next one only by addition of monomers, the authors derived the kinetic equations for analysis of protein fibrillization.

At the same time Lomakin et al. developed the ideas of Ferrone's [25] and proposed the nucleated-polymerization model (NP) for A $\beta$  fibrillization [23]. This model stipulates that above a certain critical micelle concentration (CMC)  $c^*$ , there exists a rapid thermodynamic equilibrium between the protein monomers and micelles. Formation of the nucleus occurs within the unordered micellar oligomers and is followed by fibril growth via irreversible binding of the monomers to the fibril ends:

$$\dot{N}_p = ck_e N_{p-1} - ck_e N_p + k_n M \delta_{pm_0}, \quad (8)$$

$$nL_f = \sqrt{\frac{m_0 k_e c^*}{k_n}}, \quad N_f = c_0 \sqrt{\frac{k_n}{m_0 k_e c^*}}, \quad (9)$$

where  $M$ ,  $N_p$  and  $c$  represent, respectively, the number concentration of micelles,  $p$ -mer fibers and free protein monomers;  $\dot{N}_p$  is the time-derivative;  $k_n$  and  $k_e$  are nucleation and elongation rate constants;  $\delta_{pm_0}$  represents the correction factor, or scaling term related to the formation of critical nucleus;  $m_0$  and  $n$  are the structural parameters, which mean the number of monomers in a micelle and in a fibril, respectively;  $L_f$  and  $N_f$  being the length and number of fibrils, respectively;  $c_0$  is the initial protein concentration.

Later on, in 1999, Ferrone derived the kinetic equations for the rates of monomer addition and nucleus elongation using the perturbation theory and the assumptions that a) all species present in the solution are classified either as monomers or polymers, b) the rate of polymer formation is determined by the concentration of the nuclei and the rate of their elongation, c) polymer growth occurs via accretion to their ends with the same size-independent rate constant [28]:

$$\frac{dc_p}{dt} = J^* c^*, \quad \frac{d\Delta}{dt} = J c_p, \quad c^* = K_n^* c^{n^*}, \quad \Delta = \frac{1}{2} J J^* c^* t^2, \quad (10)$$

where  $c_p$ ,  $c^*$  and  $\Delta$  standing for the concentrations of polymers, nuclei and polymerized monomers, respectively;  $J$  and  $J^*$  representing the rate of polymer addition and the rate of nucleus elongation;  $K_n^*$  and  $c^{n^*}$  denoting the equilibrium constant for nucleation and critical nucleus size, respectively.

In 2000 Serio et al. have complemented the basic statements of TA and NP models with some additional features to formulate the nucleated-conformational conversion (NCC) model [29]. This model insinuates the transition from the stable monomeric state S to the assembly-competent conformation A via structurally molten oligomeric intermediates. Once oligomeric nucleus is formed, its elongation rapidly proceeds at the fibril ends through templating or induced-fit mechanism. These unstructured intermediates are supposed to be implicated in the modification of the folding environment of the protein allowing it i) to rearrange slowly to the structured nucleus, ii) to undergo conformational transition upon binding to the preformed nucleus, and iii) to transit to the species with high degree of flexibility, which are prone to a more rapid assembly in the presence of template (nucleus).

Parallel to NCC model, Kamishira et al. proposed a three-step mechanism for calcitonin fibrillization which involves 1) formation of protein micelles, 2) micelle transformation into the nucleus, and 3) elongation of the nucleus to the fibrils [30]. Using the assumptions that i) the monomeric and micellar states are in an equilibrium and produce the same measurable signal, ii) the total concentration of monomers is always higher than critical micelle concentration, and iii) each protofibril may act as a catalytic site for the conversion from monomeric to fibrillar state, the expression for the fraction of fibrillized protein was obtained.

In 2001 Pallito and Murphy described the “off-pathway folding” model (OFF) that postulates multi-step route for fibril formation [31]. Specifically, amyloid growth was assumed to start from the denaturated state and proceeds via 1) refolding of the denaturated monomers into either stable monomer/dimer or less stable intermediate, 2) cooperative assembly of the intermediates into the nucleus, 3) elongation of the nucleus into the filaments via repeated attachment of dimeric intermediate, 4) lateral association of the filaments into fibrils, 5) fibril elongation through the end-to-end association.

Next model worth of mentioning is the “dipole-assembly” model proposed by Xu et al. in 2001. This model provides qualitative description and predicts two-step route of amyloid growth [32]. First step involves the nucleation of protein monomers into the granular or spheroid oligomers controlled presumably by hydrophobic interactions. Next, if the nucleation units possess the intrinsic dipole moment, attractive forces between the dipoles would promote further linear aggregation of the nuclei. Nucleus size is governed by the magnitude of the dipole moment which is necessary to overcome the repelling forces between the nuclei or between the nucleation units and the fibril. The overall dipole moment of the fiber enables the templating mechanism, giving rise to the binding of new nucleation units to the ends of already existing fibrils. In addition, asymmetrical distribution of the charges within the protein structure may promote dipole-dipole interactions, triggering the formation of the amyloid fibers.

In 2003 Chiti et al. developed the phenomenological approach to describe the process of protein aggregation based on the physicochemical properties of polypeptide chain [33]. Initially this concept was applied to predict the difference in aggregation propensity between the wild and mutated amyloid proteins. In 2004 this powerful scientific team extended this approach and derived an absolute protein aggregation rate as a function of both intrinsic and extrinsic (condition-dependent) physicochemical characteristics of polypeptide chain.

In the following we refer ourselves to the theoretical methodology of van Gestel and Leeuw, that describes protein fibrillization in a dilute solution [34]. Specifically, the authors suggested the statistical-mechanical model which predicts the following fibril parameters: 1) mean degree of polymerization, 2) fibril length, 3) weight fractions of the

aggregates in solution. To derive the equations of the model, three variants of boundary conditions were considered: i) *case A* – amyloid fibers have the “loose ends”, i.e. small linear stretches of the proteins in a non- $\beta$  conformation, ii) *case B* – fibrils consist only of the proteins in cross- $\beta$ -sheet conformation, i.e. the last monomer in the assembly is in a  $\beta$ -strand configuration, iii) *case C* – fibril ends may attain both of the above states.

Lattice model for fibril formation was developed in 2008 by Li et al. by combining the main principles of TA, NP and NCC models [35]. Within the concept of this model, the assembly of fibrillar aggregates takes place via three steps. The first one is the “burst phase”, characterized by the formation of mobile oligomers of different size. At the second step these oligomers are assembled to form compact, but still disordered structure with multiple intramolecular contacts. The transition into the aggregation-prone state occurs during this phase. Finally, the last stage involves the fiber formation via incorporation of the small oligomeric clusters into the large ones which act as a template. The key conclusions drawn from the analysis of protein aggregation behavior in terms of the lattice model, may be formulated as: i) the kinetics of amyloid formation is characterized by three distinct regimes, with the “burst phase” being the most rapid and the amyloid growth being the slowest one; ii) the growth kinetics depends on the temperature according to Arrhenius law; iii) the growth of the mature fibers during the last stage proceeds via Lifshitz-Slyuzov mechanism, implying that the larger clusters grow at the expense of smaller ones. This suggests that seeding of the solution with pre-formed fibrils would accelerate the fiber growth.

In 2011 NCC model was revisited by Schmit et al. who put forward the thermodynamic theory yielding the free energy landscape of different protein states involved in fibril formation [36]. This theory considers several equilibrium states of the protein: i) monomer, ii) oligomers consisted of a few polypeptide chains, iii) nucleus with  $\beta$ -sheet structure, iv) post-critical nucleus with high level of  $\beta$ -structures, v) protofilament, described as long assembly of  $\beta$ -structures, consisting of two  $\beta$ -sheets in face-to-face orientation, vi) fibril comprising a bundle of protofilaments.

The role of electrostatics in fibril formation was examined by Foderà et al. in 2013 [37]. Specifically, the authors developed the theoretical model, describing the aggregation behavior of a charged protein. The model predicts the assembly of protein monomers into the multifractal complexes based on the calculation of the free energy of spherical cluster with a certain radius  $R$ . The main conclusion reached is that the geometry of aggregate growth is controlled by the electrostatic interactions between the single proteins. At decreased values of fractal dimensions,  $d_f$ , free energy minimum shifts towards the higher radii of the cluster. The changes in growth morphology (i.e. alterations in  $d_f$ ) results in multifractal free energy profile with several minima and more compact structures being energetically favorable at the early stages of aggregation process.

In their another work this group analyzed the impact of electrostatics on the amyloid fibrils formation by describing the protein fibrillization process as a conformational transition between the soluble ( $\Pi$ ) and amyloidogenic ( $\beta$ ) states [38]. Modelization of the protein aggregation potential within the framework of this approach showed that the temporal course of  $\Pi \rightarrow \beta$  conversion is strongly slowed with increasing charging state of the hydrophilic parts of the protein.

Last but not least model worthy of mention in the present contribution is the extended lattice model of Auer [39]. This model suggests that protein  $\beta$ -sheets have weakly hydrophobic (WH) and strongly hydrophobic (SH) surfaces. Each  $\beta$ -strand is represented by the right rectangular prism. The fibril is modeled as 2D aggregate in  $m, i$  plane, where  $m, i$  denote the number of  $\beta$ -strands and  $\beta$ -sheets, respectively. The building blocks of the fiber ( $\beta$ -strands) are assumed to be arranged in 2D lattice with rectangular symmetry. Based on this approach, the equations for the nucleation work, fibril solubility, equilibrium concentration of the nuclei, and fibril nucleation rate as a function of supersaturation of protein solution, have been derived. Thermodynamic analysis of protein polymerization revealed the existence of two possible fibrillization routes. According to the first one, the process of fiber growth begins with the formation of 1 $\beta$ -sheet, that further transforms its shape into 2 $\beta$ -sheets with two SH surfaces, which then convert into 3 $\beta$ -sheets with one SH and one WH surfaces, and subsequently into 4 $\beta$ -sheets with two SH surfaces, etc. Along the second route, 1 $\beta$ -sheet transits into 2 $\beta$ -sheets with two WH surfaces, then into 3 $\beta$ -sheets with one SH and one WH surfaces, then into 4 $\beta$ -sheets with two WH surfaces and so on. SH bonds provide the arrangement of the  $\beta$ -strands into the  $\beta$ -sheets which stretch along  $m$ -axis (lengthening axis), while WH bonds cause  $\beta$ -strands to assemble along the  $i$ -axis (thickening axis).

## CONCLUSIONS

In the present work we tried to structure the available information about the molecular routes of protein fibrillization, and mathematical models proposed so far to describe this process. The models point to a scenario in which protein fibrillization proceeds via four main stages: misfolding, nucleation, elongation, amyloid fibril growth. Validated by many experimental results, this mechanism is valid for various types of proteins, and for fibrillation processes occurring under different environmental conditions.

## ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported by the grant № 0116U000937 for Young Scientists from the Ministry of Science and Education of Ukraine.

## REFERENCES

1. Chiti F., Dobson C.M. Protein Misfolding, Amyloid Formation, and Human Disease: A Summary of Progress Over the Last Decade // *Annu. Rev. Biochem.* -2017.-Vol. 86.- P. 27-68.
2. Harrison R.S., Sharpe P.C., Singh Y., Fairlie D.P. Amyloid peptides and protein in review // *Rev. Physiol. Biochem. Pharmacol.* – 2007. – Vol. 159. – P. 1-77.
3. Pham C.L.L., Kwan A.H., Sunde M. Functional amyloid: widespread in nature, diverse in purpose // *Essays Biochem.* – 2014. – Vol. 56. – P. 207-219.
4. Maji S., Schubert D., Rivier C., Lee S., Rivier J., Riek R. Amyloid as a depot for the formulation of long-acting drugs // *PLoS Biol.* – 2008. – Vol. 6. - P. e17.
5. Mankar S., Anoop A., Sen S., Maji S. Nanomaterials: amyloid reflect their brighter side // *Nano Rev.* – 2011. – Vol. 2. – P. 6032-6043.
6. Luthey-Schulten Z., Wolynes P. Theory of protein folding: the energy landscape perspective // *Annu. Rev. Phys. Chem.* – 1997. – Vol. 48. – P. 545-600.
7. Ferreira D., Hegler J., Komives E., Wolynes P. On the role of frustration in the energy landscapes of allosteric proteins // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 2011. – Vol. 108. – P. 3499-3503.
8. Straub J.E., Thirumalai D. Toward a molecular theory of early and late events in monomer to amyloid fibril formation // *Annu. Rev. Phys. Chem.* – 2011. – Vol. 62. – P. 437-463.
9. Bowerman C., Ryan D., Nissan D., Nilsson B. The effect of increasing hydrophobicity on the self-assembly of amphipathic beta-sheet peptides // *Mol. Biosyst.* – 2009. – Vol. 5. – P. 1058-1069.
10. Doran T., Kamens A., Byrnes N., Nilsson B. Role of amino acid hydrophobicity, aromaticity, and molecular volume on IAPP (20-29) amyloid self-assembly // *Proteins.* – 2012. – Vol. 80. – P. 1053-1065.
11. Lim K.H., Naqchowdhuri P., Rathinavelan T., Im W. NMR characterization of hydrophobic collapses in amyloidogenic unfolded states and their implications for amyloid formation // *Biochem. Biophys. Res. Commun.* – 2010. – Vol. 396. – P. 800-805.
12. Ramakrishna D., Prasad M., Bhuyan A. Hydrophobic collapse overrides Coulombic repulsion in ferricytochrome *c* fibrillation under extremely alkaline condition // *Arch. Biochem. Biophys.* – 2012. – Vol. 528. – P. 67-71.
13. Marek P., Abedini A., Song B., Kanungo M., Johnson M., Gupta R., Zaman W., Wong S., Raleigh D. Aromatic interactions are not required for amyloid fibril formation by islet amyloid polypeptide but do influence the rate of fibril formation and fibril morphology // *Biochemistry.* – 2007. – Vol. 46. – P. 3255-3261.
14. Gazit E. A possible role for pi-stacking in the self-assembly of amyloid fibrils // *FASEB J.* – 2002. – Vol. 16. – P. 77-83.
15. Marshall K., Morris K., Charlton D., O'Reilly N., Lewis L., Walden H., Serpell L.C. Hydrophobic, aromatic, and electrostatic interactions play a central role in amyloid fibril formation and stability // *Biochemistry.* – 2011. – Vol. 50. – P. 2061-2071.
16. Girych M., Gorbenko G., Trusova V., Adachi E., Mizuguchi C., Nagao K., Kawashima H., Akaji K., Lund-Katz S., Philips M., Saito H. Interaction of thioflavin T with amyloid fibrils of apolipoprotein A-I N-terminal fragment: resonance energy transfer study // *J. Struct. Biol.* – 2014. – Vol. 185. – P. 16-124.
17. Guest W., Cashman N., Plotkin S. Biochem. Electrostatics in the stability and misfolding of the prion protein: salt bridges, self-energy, and solvation // *Cell Biol.* – 2010. – Vol. 88. – P. 371-381.
18. Yun S., Urbanc B., Cruz L., Bitan G., Teplow D., Stanley H. Role of electrostatic interactions in amyloid  $\beta$ -protein (A $\beta$ ) oligomer formation: a discrete molecular dynamics study // *Biophys. J.* – 2007. – Vol. 92. – P. 4064-4077.
19. Gilliam J., MacPhee C. Modelling amyloid fibril formation kinetics: mechanisms of nucleation and growth // *J. Phys. Condens. Matter.* – 2013. – Vol. 25. – P. 373101-373120.
20. Oosawa F., Asakura S., Hotta K., Nobuhisa I., Ooi T. G-F transformation of actin as a fibrous condensation // *J. Polymer Sci.* – 1959. – Vol. 37. – P. 323-336.
21. Jarrett J., Lansbury P. Seeding “one-dimensional crystallization” of amyloid: a pathogenic mechanism in Alzheimer’s disease and scrapie? // *Cell.* – 1993. – Vol. 73. – P. 1055-1058.
22. Flyvbjerg H., Jobs E., Leibler S. Kinetics of self-assembling microtubules: an “inverse problem” in biochemistry // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 1996. – Vol. 93. – P. 5975-5979.
23. Lomakin A., Chung D., Benedek G., Kirschner D., Teplow D. On the nucleation and growth of amyloid  $\beta$ -protein fibrils: detection of nuclei and quantification of rate constants // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 1996. – Vol. 93. – P. 1125-1129.
24. Griffith J. Self-replication and scrapie // *Nature.* – 1967. – Vol. 215. – P. 1043-1044.
25. Ferrone F., Hofrichter J., Ferrone F.A., Hofrichter J., Sunshine H.R., Eaton W.A. Kinetic studies on photolysis-induced gelation of sickle cell hemoglobin suggest a new mechanism // *Biophys. J.* – 1980. – Vol. 32. – P. 361-377.
26. Prusiner S. Molecular biology of prion diseases // *Science.* – 1991. – Vol. 252. – P. 1515-1522.
27. Kodaka M. Requirements for generating sigmoidal time-course aggregation in nucleation-dependent polymerization model // *Biophys. Chem.* – 2004. – Vol. 107. – P. 243-253.
28. Ferrone F. Analysis of protein aggregation kinetics // *Methods Enzymol.* – 1999. – Vol. 309. – P. 256-274.
29. Serio T., Cashikar A., Kowal A., Sawicki G., Moslehi J., Serpell L., Arnsdorf M., Lindquist S. Nucleated conformational conversion and the replication of conformational information by a prion determinant // *Science.* – 2000. – Vol. 289. – P. 1317-1321.
30. Kamishira M., Naito A., Tuzi S., Nosaka A., Saito H. Conformational transitions and fibrillation mechanism of human calcitonin as studied by high-resolution solid-state  $^{13}\text{C}$  NMR // *Protein Sci.* – 2000. – Vol. 9. – P. 867-877.
31. Pallito M., Murphy R. A mathematical model of the kinetics of beta-amyloid fibril growth from the denaturated state // *Biophys. J.* – 2001. – Vol. 81. – P. 1805-1822.

32. Xu S., Bevis B., Arnsdorf M. The assembly of amyloidogenic yeast sup35 as assessed by scanning (atomic) force microscopy: an analogy of linear colloidal aggregation? // *Biophys. J.* – 2001. – Vol. 81. – P. 446-454.
33. Chiti F., Stefani M., Taddei N., Ramponi G., Dobson C. Rationalization of the effects of mutations on peptide and protein aggregation rates // *Nature.* – 2003. – Vol. 424. – P. 805-808.
34. van Gestel J., de Leeuw S. A statistical-mechanical theory of fibril formation in dilute protein solutions // *Biophys. J.* – 2006. – Vol. 90. – P. 3134-3145.
35. Li M., Klimov D., Straub J., Thirumalai D. Probing the mechanisms of fibril formation using lattice models // *J. Chem. Phys.* – 2008. – Vol. 129. – P. 175101-175110.
36. Schmit J., Ghosh K., Dill K. What drives amyloid molecules to assemble into oligomers and fibrils? // *Biophys. J.* – 2011. – Vol. 100. – P. 450-458.
37. Foderà V., Zaccone A., Lattuada M., Donald A. Electrostatics controls the formation of amyloid superstructures in protein aggregation // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 111. – P. 108105-108109.
38. Di Michele L., Eiser E., Foderà V. Minimal model for self-catalysis in the formation of amyloid-like elongated fibrils // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2013. – Vol. 4. – P. 3158-3164.
39. Auer S. Amyloid fibril nucleation: effect of amino acid hydrophobicity // *J. Phys. Chem. B.* – 2014. – Vol. 118. – P. 5289-5299.

PACS: 61.50.Ah, 64.10.+h

**THERMODYNAMICS AND STRUCTURAL CONDITION OF Pb-Sb ALLOYS****N.Yu. Filonenko***State Establishment "Dnipropetrovsk Medical Academy of Health Ministry of Ukraine"**Vladimir Vernadsky Str., 9, Dnipro, 49044, Ukraine**e-mail: natph2016@gmail.com*

Received 9 December, 2017

In this paper we study the structural condition and thermodynamic functions of a melt of the Pb-Sb. The investigations were performed for alloys with an antimony content of 5.0-20.0% (wt.), the rest is lead. To determine the structural condition of alloys we use microstructure analysis, differential thermal and X-ray structural analyses. The phase composition of alloys was determined in relation to the temperature of the liquid heating above the liquidus curve and to the cooling rate. With accounting for the first degree approximation of high-temperature expansion of the thermodynamic potential in expression for the Gibbs energy of a melt of the binary Pb-Sb alloy we find the curve of thermodynamic stability of the liquid depending on the antimony content in alloy. This approach enables to give the most complete description of the alloys' melt from the thermodynamic point of view and to determine a thermodynamic stability curve, above which there are no microcomplexes in the phase. The results of the calculations obtained in this paper are in good agreement with the experimental data.

**KEY WORDS:** Pb-Sb alloys, free energy of the phase, melt, thermodynamic stability**ТЕРМОДИНАМІКА ТА СТРУКТУРНИЙ СТАН СПЛАВІВ СИСТЕМИ Pb-Sb****Н.Ю. Філоненко***ДЗ «Дніпропетровська державна медична академія МОЗ України»**49044, Україна, м. Дніпро, вул. Володимира Вернадського, 9*

У роботі досліджено структурний стан та отримані термодинамічні функції розплаву Pb-Sb. Дослідження проводили на сплавах з вмістом сурми 5,0-20,0 % (мас.), решта свинець. Для визначення структурного стану сплавів використовували мікроструктурний, рентгеноструктурний та диференційний термічний аналізи. Було визначено фазовий склад сплавів в залежності від температури нагріву розплаву вище лінії ліквідусу та швидкості охолодження. З врахуванням внеску наближення першого ступеня високотемпературного розвинення термодинамічного потенціалу в виразі для енергії Гіббса рідини бінарного сплаву Pb-Sb отримано лінію термодинамічної стійкості розплаву в залежності від вмісту сурми в сплаві. Використаний у даній роботі підхід дає можливість надати найбільш повний з термодинамічної точки зору опис розплаву сплавів та визначити лінію термодинамічної стійкості, вище якої в фазі відсутні будь-які мікрокомплекси. Отримані результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними даними.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** сплави Pb-Sb, енергія Гіббса, розплав, термодинамічна стійкість**ТЕРМОДИНАМИКА И СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Pb-Sb****Н.Ю. Филоненко***ГУ «Днепропетровская государственная медицинская академия МОЗ Украины»**49044, Украина, г. Днепр, ул. Владимира Вернадского, 9*

В работе исследованы структурное состояние и получены термодинамические функции расплавов Pb-Sb. Исследования проводились на сплавах с содержанием сурьмы 5,0-20,0% (мас.), остальное – свинец. Для определения структурного состояния использовали микроструктурный, рентгеноструктурный и дифференциальный термический анализы. Был определен фазовый состав сплавов после охлаждения до комнатной температуры в зависимости от температуры нагрева расплава выше линии ликвидуса и скорости охлаждения. С учетом вклада приближения первой степени високотемпературного разложения термодинамического потенциала в выражении для энергии Гиббса бинарного расплава Pb-Sb получена линия термодинамической устойчивости расплава в зависимости от содержания сурьмы в сплаве. Используемый в данной работе подход позволяет предоставить наиболее полное с термодинамической точки зрения описание плавления сплавов и определить линию термодинамической устойчивости, выше которой в расплаве отсутствуют какие-либо микрокомплексы. Полученные в работе результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** сплавы Pb-Sb, энергия Гиббса, расплав, термодинамическая устойчивость

Сплави системи Pb-Sb відносяться до діаграм першого типу, в яких обмежена розчинність у твердому стані та не утворюють хімічних сполук [1]. Як відомо, у сплавах Pb-Sb при вмісті сурми 13,1 % (мас.) та температурі  $T_e=(525,3\pm 0,5)$  К відбувається утворення евтектики  $L= Pb+Sb$  [2-4].

Наразі відомо, що при температурах, що перевищують температуру кристалізації в розплавах металів та сплавів спостерігали мікроконцентраційну неоднорідність [5-6]. Як відомо, одним із методів визначення наявності мікрокомплексів в розплаві є визначення в'язкості розплаву [7]. Проведені дослідження залежності в'язкості сплавів Pb-Sb від температури показали, що при збільшенні температури в'язкість сплавів зменшується [8-10], що пов'язують зі зменшенням або відсутністю в розплаві сплавів утворення мікрокомплексів.

Таким чином, явища, які спостерігали в рідкому стані металів та сплавів притаманні для систем, які



знаходяться в критичному стані [11]. Для таких систем характерна наявність температури при якій відсутні будь-які комплекси в розплаві.

Як відомо, швидкість охолодження впливає на процес кристалізації сплавів. За результатами впливу швидкого охолодження сплавів системи Pb-Sb до температури 83 К були виявлені нові фази, які включають в себе ОЦК (W-A2-типу) та примітивну кубічну фазу скоординованої (можливо, типу NaCl-B1) [12]. Вплив швидкого охолодження на сплави розглянуто в роботі [13], в якій, зокрема, зазначено, що переохолодження сурми досягає  $\Delta T=408$  К, а свинцю  $\Delta T=353$  К, а в роботі [7] вказано, що для сурми відносно переохолодження  $\Delta T=279$  К, а свинцю  $\Delta T>474$  К.

Таким чином, метою даної роботи було дослідити структурний стан сплавів Pb-Sb в залежності від температури нагріву сплаву вище лінії ліквідусу, швидкості охолодження, а також визначити границю однорідного та неоднорідного розплаву.

### МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

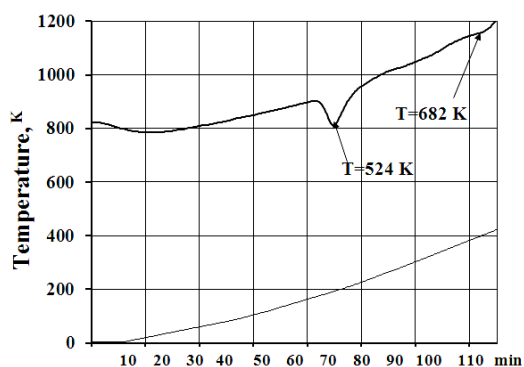
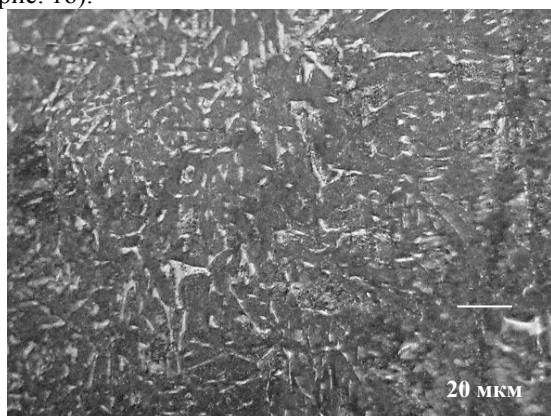
Дослідження проводили на зразках із вмістом сурми 5,0-20,0 % (мас.), решта свинець. Для отримання яких використовували шихту такого складу: свинець з вмістом 99,9 % (мас.) та сурму з вмістом 99,9 % (мас.). Для попередження ліквідації сплави виготовляли із заздалегідь ретельно перемішаних і спресованих порошків матеріалів шихти. Виплавку зразків проводили при температурах 520-900 К в печі Тамана з графітовим нагрівачем. Швидкість охолодження сплавів складала 10 К/с. Частину зразків виготовляли таким же методом, але після нагріву виливали в клиновидні форми, за рахунок чого при охолодженні в широкій частині клина була отримана швидкість охолодження  $10^2$  К/с, в середній  $10^3$  К/с, а в тонкій  $10^4$  К/с.

Для визначення хімічного складу сплаву використовували хімічний та спектральний аналіз [14]. Для визначення температури фазових перетворень використали термічний аналіз на «Деревотографі» зі швидкістю нагріву  $2 \text{ К}\cdot\text{хв}^{-1}$ . Фазовий склад сплавів після охолодження визначали методом мікрорентгеноспектрального аналізу на мікроскопі JSM-6490, а також за допомогою оптичного мікроскопу «Неофот-21». Рентгеноструктурний аналіз здійснювали на дифрактометрі ДРОН-3 в монохроматизованому  $\text{Co}_\alpha$  випромінюванні.

### РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Доевтектичні сплави мають наступну структуру: первинні дендрити та не регулярна евтектика свинцю та сурми, заевтектичні – первинні кристали сурми та евтектика.

Морфологія евтектики в сплавах системи Pb-Sb має майже регулярну структуру (рис. 1а). За результатами диференційного термічного аналізу температура утворення евтектики складала 523 К при вмісті сурми 13,0 % (мас.) (рис. 1б).



а

б

Рис. 1. Сплав Pb-Sb з вмістом сурми 13,0 % (мас.)

а – мікроструктура після охолодження, б – крива диференційного термічного аналізу

На кривій диференційного термічного аналізу спостерігали в інтервалі температур 680-700 К у розплаві евтектичного сплаву незначний тепловий ефект, який свідчить про зміну структури рідини. Для визначення впливу нагріву вище лінії ліквідусу на формування структури сплавів охолоджених з різними швидкостями зразки сплавів Pb-Sb нагрівали до температури на 520-900 К та виливали в клиновидні форми. Нагрів розплаву вище лінії ліквідусу до 150 К як доевтектичних, евтектичних, так і заевтектичних сплавів не призвів до значної зміни структурних складових та їх морфології.

В доевтектичному сплаві (вміст сурми 11,2 % (мас.)), який був нагрітий вище лінії ліквідусу на 200 К спостерігали формування первинних кристалів свинцю в матриці з евтектикою. При швидкості охолодження сплавів  $10^2$  К/с відбувається формування кристалів свинцю (12-20 мкм) та збільшення їх об'ємної частки у

порівнянні з зразками з таким же вмістом сурми, які охолоджені з більшими швидкостями охолодження (рис. 2а). Збільшення швидкості охолодження до  $10^3$  K/c призводить до формування більш неоднорідних за розміром первинних кристалів свинцю (7-10 мкм). Евтектика має більш дисперсну структуру в порівнянні з зразками, які були охолоджені з меншою швидкістю.

Зміну морфології евтектики від пластинчастої до дрібнодисперсної стержневої спостерігали в ділянці клина охолодженої зі швидкістю  $10^4$  K/c та значне зменшення об'ємної частки первинних кристалів свинцю (рис. 2б).

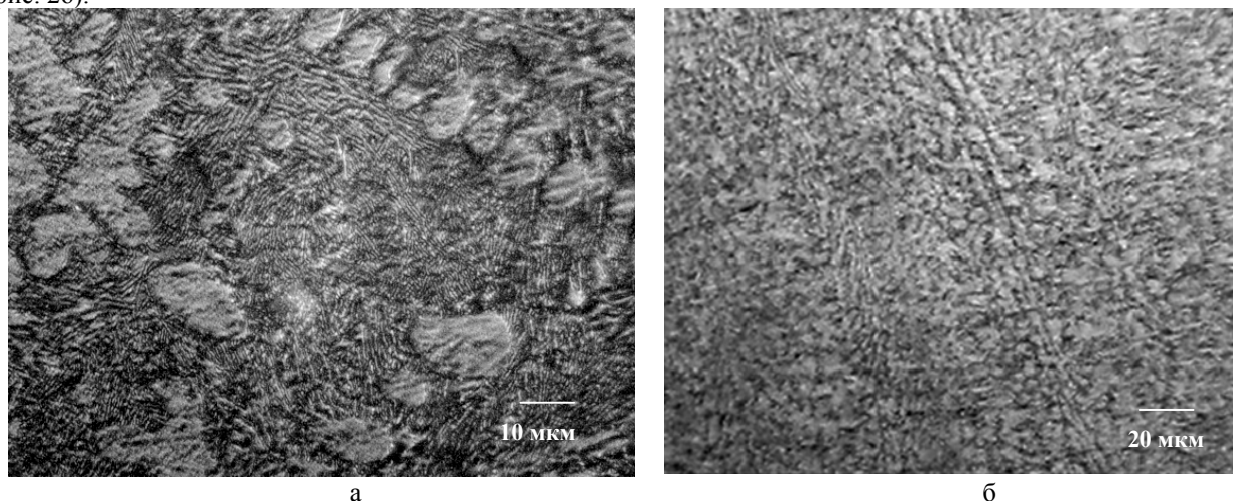


Рис. 2. Мікроструктура сплаву Pb-Sb з вмістом сурми 11,2 % (мас.)  
а – швидкість охолодження  $10^2$  K/c×500, б – швидкість охолодження  $10^4$  K/c×1000

Після охолодження зі швидкістю  $10^2$  K/c товстої частини клина заевтектичного сплаву (з вмістом 15% (мас.) сурми) спостерігали виділення первинних кристалів сурми в евтектиці, яка має нерегулярну морфологію (рис.3а). Мікроструктура тонкої частини клина охолодженого зі швидкістю  $10^4$  K/c представлена дрібнодисперсною сумішшю свинцю та сурми (рис. 3б). Виділення первинних кристалів сурми в даній частині клина не спостерігали.

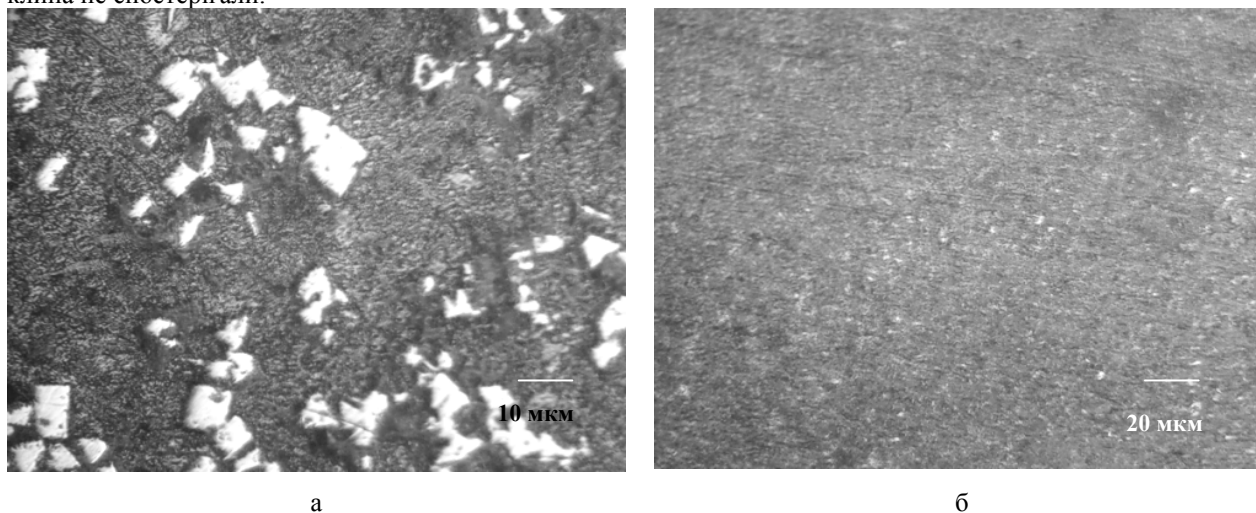


Рис. 3. Мікроструктура сплаву Pb-Sb з вмістом сурми 15,0 % (мас.)  
а – швидкість охолодження  $10^2$  K/c, б – швидкість охолодження  $10^4$  K/c

Результати рентгенофазового аналізу сплавів показали, що в доевтектичному сплаві Pb-Sb при вмісті сурми 11,2 % (мас.) відбувається незначний зсув на лініях дифрактограми в бік менших кутів, а в заевтектичному сплаві при вмісті сурми 15,0 % (мас.) не спостерігали зміщення та змінення інтенсивності ліній дифрактограми (рис. 4).

Таким чином, при підвищенні температури перегріву сплавів вище лінії ліквідусу на 200 K та послідовному охолодженні відбувається утворення дрібнодисперсної евтектики та значне зменшення об'ємної частки первинних кристалів.

Для визначення впливу температури нагріву розплаву на формування структури сплаву можна застосувати розрахунковий метод. Як відомо, для того, щоб система знаходилась в стані термодинамічної стійкої рівноваги, треба щоб D (детермінант стійкості системи) та коефіцієнти головної діагоналі були позитивні [16].

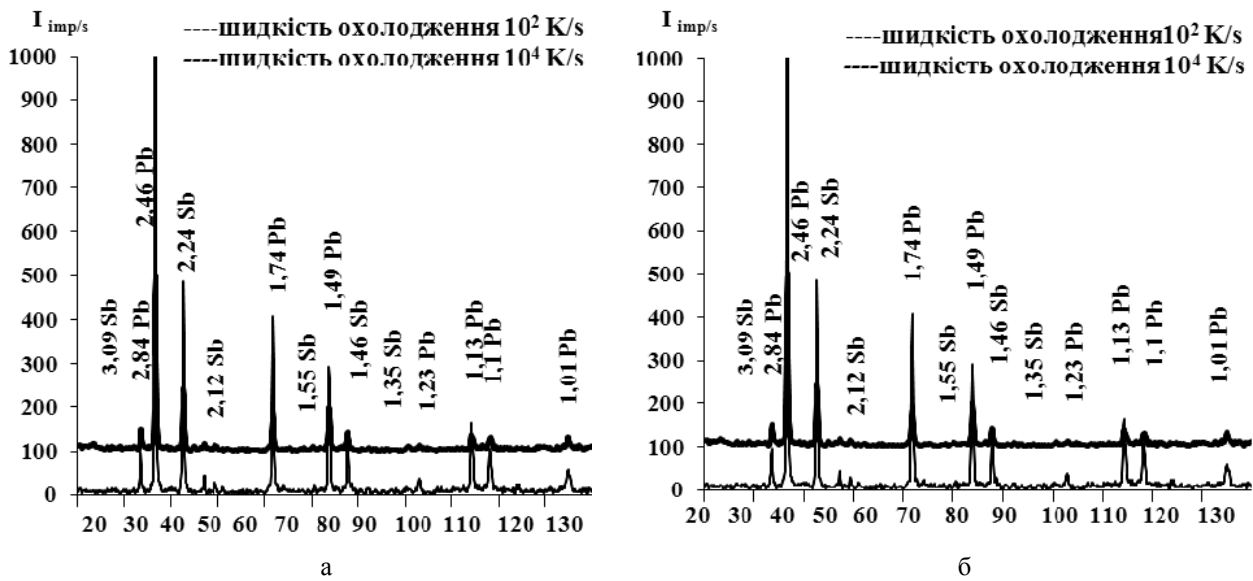


Рис. 4. Дифрактограма сплавів  
а – вміст сурми 11,2 % (мас.), б – вміст сурми 15,0 % (мас.)

Випадок, коли  $D=0$  був вперше зазначений Гіббсом, як критичний стан речовини [16]. При закритичних переходах детермінант і коефіцієнти стійкості проходять через скінченні мінімуми, які відповідають розвитку флуктуацій. Граничним випадком, який є критичним станом, коли флуктуації в системі досягають максимальних значень, детермінант стійкості і коефіцієнти стійкості проходять через мінімуми, які дорівнюють нулю. Для визначення цих значень розглянемо умову, при якій  $dD=0$ .

При розрахунку термодинамічних функцій фаз для високотемпературної області врахували внесок першого ступеня наближення високотемпературного розвинення термодинамічного потенціалу бінарного сплаву у вигляді нескінченного ряду за ступенями  $1/T$  [17].

Енергію Гіббса з урахуванням наближення першого ступеня для розплаву Pb-Sb визначимо як:

$$G_m = x_1 G_1^0 + x_2 G_2^0 + RT(x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2) + x_1 x_2 L_{12} - \frac{L_{12}^2 x_1^2 x_2^2}{2ZTR}, \quad (1)$$

де  $x$  – масовий вміст елементів. Для мольних часток компонентів в сполучі чи сплаві виконується умова  $\sum_{i=1}^2 x_i = 1$ . Використовуючи дані для чистих компонент  $^0G_{Pb}$ ,  $^0G_{Sb}$  [18-19], а дані енергії взаємодії між компонентами в фазі  $L_{Pb,Sb}$  з робіт [2-3], були отримані залежності енергії Гіббса розплаву від температури.

Детермінант стійкості розплаву з урахуванням (1) має вигляд:

$$D = \begin{vmatrix} \frac{L_{12}^2 x_1^2 x_2^2}{ZRT^3} & R(\ln x_2 + 1) + \frac{L_{12}^2 x_1^2 x_2^2}{ZRT^2} & R(\ln x_1 + 1) + \frac{L_{12}^2 x_1 x_2^2}{ZRT^2} \\ R(\ln x_2 + 1) + \frac{L_{12}^2 x_1^2 x_2^2}{ZRT^2} & \frac{RT}{x_2} - \frac{L_{12}^2 x_1^2}{ZRT} & \frac{-2L_{12}^2 x_1 x_2}{ZRT} \\ R(\ln x_1 + 1) + \frac{L_{12}^2 x_1 x_2^2}{ZRT^2} & \frac{-2L_{12}^2 x_1 x_2}{ZRT} & \frac{RT}{x_1} - \frac{L_{12}^2 x_2^2}{ZRT} \end{vmatrix}$$

Для визначення стійкості повинна виконуватись умова  $dD = 0$ .

$$dD = \left( \frac{\partial D}{\partial T} \right)_x dT + \left( \frac{\partial D}{\partial x_1} \right)_T dx_1 + \left( \frac{\partial D}{\partial x_2} \right)_T dx_2 = 0.$$

Умова виконується, коли

$$\left( \frac{\partial D}{\partial T} \right)_x = 0, \quad \left( \frac{\partial D}{\partial x_1} \right)_T = 0, \quad \left( \frac{\partial D}{\partial x_2} \right)_T = 0. \quad (2)$$

Результат розв'язку системи (2) представлений на рис. 5.

Таким чином, за результатами вище приведених розрахунків для отримання однорідної розплаву Pb-Sb, яка не містить мікроділянок з ближнім порядком, необхідно виконати перегрів на 170-250 К в залежності від вмісту сурми в сплаві, що корелює з експериментальними даними (рис. 5).

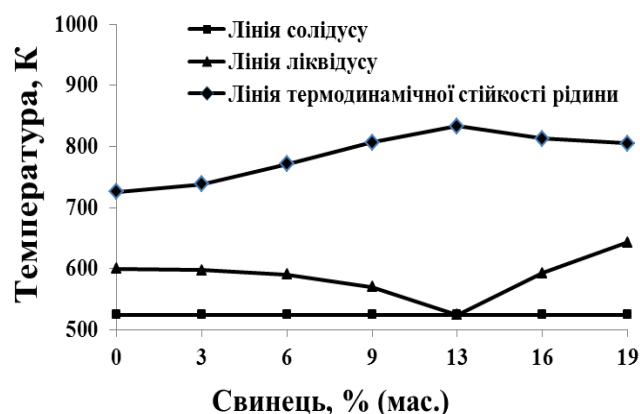


Рис. 5. Лінія термодинамічної стійкості на діаграмі стану системи Pb-Sb

Аналіз отриманих результатів показав, що нагрів розплаву Pb-Sb вище від лінії ліквідусу на 170-250 К призводить до зменшення об'ємної частки первинних кристалів свинцю при кристалізації для доевтектичного сплаву, а в заевтектичному сплаві об'ємної частки первинних кристалів сурми. При швидкостях охолодження  $10^4$  К/с відбувається утворення дрібнодисперсної евтектики та пригнічення процесу формування первинних кристалів.

### ВИСНОВКИ

1. Температура нагріву розплаву та швидкість охолодження впливає на розмір та об'ємну частку первинних кристалів для сплавів доевтектичного, евтектичного та заевтектичного складу.
2. У сплавах системи Pb-Sb не залежно від температури нагріву та вмісту сурми не відбулося змін фазового складу. Перегрів розплаву на температуру вище 170-250 К та при послідовному охолодженні призводить до утворення дрібнодисперсної евтектичної структури та пригнічення процесу формування первинних кристалів свинцю та сурми у порівнянні зі зразками, які мали меншу температуру перегріву.
3. Результати розрахунку з урахуванням внеску наближення першого ступеня високотемпературного розвинення термодинамічного потенціалу бінарного сплаву дали змогу отримати лінію термодинамічної стійкості плавлення сплавів системи Pb-Sb та дозволили визначити температурний інтервал при якому в розплаві відсутні мікрокомплекси, а також дали можливість прогнозувати кінцеву структуру сплаву.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Lyakishev N.P. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskih sistem: Spravochnik [Phase Diagrams of Binary Metal Systems: Handbook]. Vol. 3, book 1. – Moscow: Mashinostroenie, 2001. – 498 p.
2. Hassama S., Boab D., Fouquea Y., Kotchib K.P., Roge J. Thermodynamic investigation of the Pb-Sb system // Journal of Alloys and Compounds. – 2009. – Vol.476. – P.74–78.
3. Ashtakala, Pelton A.D., Bale C.W The Pb-Sb (Lead-Antimony) // System Bulletin of Alloy Phase Diagrams. – 1981. – Vol.2(1). – P. 86-89.
4. Abdel-Reihim, Hess N., Reif W., Birch M.E.J. Effect of solute content on the grain refinement of binary alloys // Journal of Materials science. – 1987. – No. 22. – P. 213-218.
5. Taran Yu.N., Mazur V.I. Struktura evtekticheskikh spлавov [Structure of eutectic alloys]. – Moscow: Metallurgiya, 1978. – 312 p.
6. Zhukova L.A., Popel S.I. Elektronograficheskoe issledovanie stroeniya rasplavov [Electrographic study of the structure of melts] // Journal of Physical Chemistry. – 1982. – Vol. 56(11). – P. 2702–2706.
7. Somov A.I., Tihonovskiy M.A. Evtekticheskie kompozitsii [Eutectic compositions]. – Moscow: Metallurgiya, 1975. – 287 p.
8. Crawley A.F. The viscosities of some lead-antimony and lead-antimony-tin alloys // Physics and Chemistry of Liquids: A International Journal. – 1970. – Vol.2(2). – P. 77-85.
9. Pola A., Gelfi M., Modegell M., Roberti R. Semisolid lead-antimony alloys for cars batteries // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. – 2010. – Vol. 20. – P. 1774-1779.
10. Morioka S., Xiufang Bian, Minhua Sun A model of viscosity for liquid metals // Z. Metallkunde. – 2002. – Bd 93(4). – P. 288-292.
11. Kalashnikov E.V. Termodinamicheski neustoychivyye sostoyaniya v evtekticheskikh sistemah [Thermodynamic unstable state in thermodynamic systems] // Journal of Technical Physics. – 1997. – Vol. 67(4). – P. 7-12.
12. Claude Borromee-Gautier, Giesen Bill C., Nicholas Grant J. Metastable Phases in the Pb-Sb and Pb-Bi Systems // Journal of chemical physics. – 1968. – Vol.48(5). – P. 1905-1911.
13. Perepezko J.H. Solidification of highly supercooled liquid metals and alloys // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1993. – P. 463-472.
14. Tverdokhlebova S.V. Spectrometry of the boron-containing alloys // Visnyk Dnipropetrovskogo nacionalnogo universitetu.

- Seriya.fizika. Radioelektronika. – 2007. – Vol. 14(12/1). – P. 100–104.
15. Syichev V.V. *Differentsialnyie uravneniya termodinamiki* [Differential equations of thermodynamics]. – Moscow: Vysshaya shkola, 1991. – 220 p.
  16. Gibbs Dzh.V. *Termodinamicheskie raboty* [Thermodynamics work]. – Moscow: Gosteh izdat, 1950 – 320 p.
  17. Zhirifalko L. *Statisticheskaya fizika tverdogo tela* [Statistical Solid State Physics]. – Moscow: Mir, 1975. – 376 p.
  18. Roble R.A., Waldbaum D.R. *Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298.15°K (25.0°C) and One Atmosphere (1.013 Bars) Pressure and at Higher Temperatures* Orton memorial library the OHIO State University 155 S. Oval Drive, 1970. – P. 262.
  19. *SGTE data for pure elements* A T Dinsdale NPL Materials Centre, Division of Industry and Innovation, National Physical Laboratory, Teddington, Middlesex, TW11 0LW, UK. – 174 p.

PACS: 61.72.Ji;61.72.Ss;61.82.Bg;64.75.+g;66.30.Jt

## MODELING RADIATION-INDUCED SEGREGATION IN BINARY ALLOYS

R.V. Skorokhod<sup>1</sup>, O.M. Buhay<sup>2</sup>, V.M. Bilyk<sup>2</sup>, V.L. Denysenko<sup>2</sup>, O.V. Koropov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University  
4, Svobody sq., 61022 Kharkiv, Ukraine

<sup>2</sup>Institute of Applied Physics of NAS of Ukraine  
58, Petropavlivska St., 40030 Sumy, Ukraine

e-mail: [r.skorokhodqq@gmail.com](mailto:r.skorokhodqq@gmail.com)

Received January 26, 2018

A computer code to calculate the time and space dependencies of the defect and component concentrations of a binary alloy is developed. This code is based on the theoretical model for radiation-induced segregation governed by first and second Fick's laws with taking into account inverse Kirkendall effect. The system of three coupled partial differential equations for concentrations of one of components and point defects is converted to the system of ordinary differential equations in time by a discretization procedure. Numerical solutions of this system are obtained under appropriate initial and boundary conditions by means of the MATLAB. The modeling of radiation-induced segregation in binary Fe-Cr alloys is carried out for various initial concentrations of components, temperatures, dose rates and doses. The process of achievement of steady state at dose rising is demonstrated. The calculated concentration profiles are compared with experimental profiles published in literature. The sensitivity of model to input parameters is done and the capabilities of proposed model are estimated. This computer code for multicomponent alloys is developed.

**KEY WORDS:** materials of nuclear engineering, radiation-induced segregation, binary metal alloys, concentration profiles, point defects, inverse Kirkendall effect, balance equations, computer simulation

## МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЦІЙНО-ІНДУКОВАНОЇ СЕГРЕГАЦІЇ В БІНАРНИХ СПЛАВАХ

Р.В. Скороход<sup>1</sup>, О.М. Бугай<sup>2</sup>, В.М. Білик<sup>2</sup>, В.Л. Денисенко<sup>2</sup>, О.В. Коропов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
майдан Свободи, 4, м. Харків 61022, Україна

<sup>2</sup>Інститут прикладної фізики НАН України  
вул. Петропавлівська, 58, м. Суми 40030, Україна

В моделі радіаційно-індукованої сегрегації, що базується на першому та другому законах Фіка з урахуванням оберненого ефекту Кіркендалла, розроблений комп'ютерний код, за допомогою якого для бінарних сполук знайдені просторова і часова залежності концентрацій компонентів та точкових дефектів. Система трьох зв'язаних диференціальних рівнянь в частинних похідних для концентрацій одного з компонентів та точкових дефектів процедурою дискретизації зводиться до системи звичайних диференціальних рівнянь за часом. Ця система чисельно розв'язується при заданих початкових та граничних умовах за допомогою пакету прикладних програм MATLAB. Проведено моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в двокомпонентних сплавах Fe-Cr при різних початкових концентраціях компонентів, температурах, швидкостях утворення дефектів і набраних дозах опромінення. Продемонстрований процес досягнення стаціонарного стану при збільшенні дози опромінення. Розраховані профілі концентрації компонентів порівнюються з експериментально одержаними іншими авторами. Виконана оцінка чутливості моделі до вхідних параметрів та оцінюються її можливості. Даний комп'ютерний код розвинений для багатокомпонентних сплавів.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** матеріали реакторобудування, радіаційно-індукована сегрегація, двокомпонентні металеві сплави, профіль концентрації, точкові дефекти, обернений ефект Кіркендалла, рівняння балансу, комп'ютерне моделювання

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОЙ СЕГРЕГАЦИИ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ

Р.В. Скороход<sup>1</sup>, А.Н. Бугай<sup>2</sup>, В.М. Билик<sup>2</sup>, В.Л. Денисенко<sup>2</sup>, А.В. Коропов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
пл. Свободы, 4, г. Харьков 61022, Украина

<sup>2</sup>Институт прикладной физики НАН Украины  
ул. Петропавловская, 58, г. Сумы 40030, Украина

В модели радиационно-индуцированной сегрегации, основанной на первом и втором законах Фика с учетом обратного эффекта Киркендалла, разработан компьютерный код, с помощью которого для бинарных соединений находится пространственная и временная зависимости концентраций компонентов и точечных дефектов. Система трех связанных дифференциальных уравнений в частных производных для концентраций одного из компонентов и точечных дефектов процедурой дискретизации приводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений по времени. Эта система численно решается при заданных начальных и граничных условиях с помощью пакета прикладных программ MATLAB. Проведено моделирование радиационно-индуцированной сегрегации в двухкомпонентных сплавах Fe-Cr при различных начальных концентрациях компонентов, температурах, скоростях образования дефектов и набранных дозах облучения. Продемонстрирован процесс достижения стационарного состояния при увеличении дозы облучения. Рассчитанные профили концентрации компонентов сравниваются с экспериментально полученными другими авторами. Выполнена оценка чувствительности модели к входным параметрам и оцениваются ее возможности. Данный компьютерный код разработан для многокомпонентных сплавов.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** материалы реакторостроения, радиационно-индуцированная сегрегация, двухкомпонентные

металлические сплавы, профиль концентрации, точечные дефекты, обратный эффект Киркендалла, уравнения баланса, компьютерное моделирование

Перехід до ядерних реакторів IV покоління [1, 2] вимагає удосконалення сплавів, які є конструкційними матеріалами реакторів, що потребує фундаментального розуміння еволюції їхньої мікроструктури в широкому діапазоні температур та умов опромінення [3].

Як відомо, в матеріалах, які використовуються в ядерних реакторах, нейтронне опромінювання породжує нерівноважні точкові дефекти (вакансії та міжвузельні атоми) у великих концентраціях, а також лінійні та об'ємні структурні дефекти (дислокації, пори та виділення нової фази) [3, 4].

Експерименти показують [4–13], що під час опромінення сплаву при підвищених температурах (0.3 – 0.5  $T_{пл.}$ ) [14] відбувається просторовий перерозподіл компонентів даного сплаву. Дане явище називається радіаційно-індукованою сегрегацією і може призвести до збагачення або збіднення домішкових та легуючих елементів в областях навколо вільних поверхонь, дислокацій, пор, меж між фазами та міжзеренних меж [15]. Це викликає зміни локальних властивостей твердого тіла і сприйнятливості до процесів, які можуть негативно позначитися на механічних властивостях, корозійній стійкості тощо [16]. Дане явище певною мірою притаманне для всіх сплавів [17].

Існують два домінуючі механізми сегрегації: вакансійний і міжвузельний [18,19], які виникають завдяки оберненому ефекту Кіркендала. У першому випадку потік вакансій до нерухомих стоків дефектів врівноважується протилежним за напрямком потоком атомів компонентів сплаву, в іншому випадку – потік міжвузельних атомів врівноважується потоком атомів компонентів сплаву, які мігрують як міжвузельні атоми [20].

Точкові дефекти, які виникають внаслідок опромінювання матеріалу, є рухомими і переміщуються до місць їх поглинання (стоків дефектів). Сегрегація відбувається, коли даний легуючий компонент переважно асоціюється з потоком дефектів. Збагачення або збіднення окремого елемента залежить від відносної взаємодії кожного елемента з потоком дефектів [21].

Метою роботи є розроблення комп'ютерного коду для знаходження концентраційних профілів компонентів бінарного сплаву, застосування цього коду до одержання залежностей цих профілів від температури, швидкості продукування дефектів, набраної дози, товщини плівки та порівняння з експериментом. Також проводиться оцінка чутливості та можливостей розглянутої моделі.

### БАЗОВА МОДЕЛЬ

Розглянемо двокомпонентний сплав елементів А та В і будемо вважати, що обидві компоненти розподілені випадково по всьому зразку, який представлений тонкою плівкою товщиною  $l$ . Вважається, що плівка обмежена площинами, які є ідеальними стоками точкових дефектів, тобто стоками такої потужності, що концентрації точкових дефектів в безпосередній близькості до стоків не змінюються при опроміненні. Також вважається, що плівка не містить об'ємних стоків точкових дефектів. В результаті опромінення при підвищених температурах локальні концентрації вакансій  $C_v$  та міжвузельних атомів  $C_i$  змінюються з часом за законами, які для одновимірною випадку мають вигляд [15]:

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ (d_{Av} - d_{Bv}) C_v \alpha \Omega \frac{\partial C_A}{\partial x} - (d_{Av} C_A + d_{Bv} C_B) \Omega \frac{\partial C_v}{\partial x} \right] + K_0 - R, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ -(d_{Ai} - d_{Bi}) C_i \alpha \Omega \frac{\partial C_A}{\partial x} - (d_{Ai} C_A + d_{Bi} C_B) \Omega \frac{\partial C_i}{\partial x} \right] + K_0 - R, \quad (2)$$

де  $\alpha$  – термодинамічний фактор, який враховує різницю між градієнтами хімічного потенціалу та концентрації,  $d_{Ai}$ ,  $d_{Av}$ ,  $d_{Bi}$ ,  $d_{Bv}$  – парціальні коефіцієнти дифузії (diffusivity coefficients [20]) елементів А та В, які дифундують за міжвузельними та вакансійними механізмами відповідно,  $K_0$  – швидкість продукування пар Френкеля опроміненням,  $R$  – швидкість рекомбінацій вакансій та міжвузельних атомів,  $\Omega$  – середній атомний об'єм сплаву. Відмітимо, що  $K_0$  залежить від типу іонізуючого випромінювання, однак в даній роботі ця величина задається довільно. Оскільки в розглянутій моделі відсутні об'ємні стоки точкових дефектів, швидкості  $K_0$  та  $R$  для міжвузельних атомів можна вважати рівними швидкостям для вакансій [15]. Для швидкості рекомбінації застосовується вираз [22]:

$$R = 4\pi r_{iv} \left[ \Omega (d_{Av} - d_{Bv} + d_{Ai} - d_{Bi}) C_A + (d_{Bv} + d_{Bi}) \right] C_v C_i, \quad (3)$$

де  $r_{iv}$  – радіус рекомбінації. В даній роботі прийнято  $r_{iv} = 10a$  [20], де  $a$  – постійна решітки. Для компонентів А та В виконуються закони збереження речовини (рівняння балансу) [15]:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ -(d_{Ai}C_i - d_{Av}C_v) \alpha \Omega \frac{\partial C_A}{\partial x} - \left( d_{Av} \frac{\partial C_v}{\partial x} - d_{Ai} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) \Omega C_A \right], \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ -(d_{Bi}C_i - d_{Bv}C_v) \alpha \Omega \frac{\partial C_B}{\partial x} - \left( d_{Bv} \frac{\partial C_v}{\partial x} - d_{Bi} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) \Omega C_B \right]. \quad (5)$$

Зазначимо, що у написаних вище рівняннях концентрації елементів та дефектів вимірюються числом атомів або вакансій в одиниці об'єму  $C_m = N_m/V^{tot}$ , де  $N_m$  – число атомів чи вакансій сорту  $m = A, B, v, i$ , а  $V^{tot}$  – об'єм сплаву. Надалі концентрацію вимірюватимемо в долях числа атомів чи вакансій по відношенню до загального числа атомів та вакансій двокомпонентного розчину  $X_m = N_m/N^{tot}$ , де  $N^{tot}$  – сумарне число атомів сплаву. Середній атомний об'єм  $\Omega = V^{tot}/N^{tot} = \frac{V^{tot}/N_m}{N^{tot}/N_m} = \frac{1/C_m}{1/X_m}$ , звідки випливає, що доля  $X_m = \Omega \cdot C_m$ .

Оскільки для більшості сплавів концентрації дефектів дуже малі в порівнянні з концентраціями компонентів сплаву [17, 20], з високим ступенем точності можна вважати, що  $X_A + X_B = 1$ . В подальшому рівняння для елемента В не будемо наводити, тому що  $X_B = 1 - X_A$ .

### Початкові та граничні умови

Для одержання розподілів атомів та точкових дефектів в часі та в просторі розв'яжемо систему зв'язаних диференціальних рівнянь (1), (2), (4) в частинних похідних, використовуючи такі початкові та граничні умови.

Розподіл концентрацій сплаву в початковий момент часу ( $t = 0$ ) є рівномірним:

$$X_A(t, x)|_{t=0} \equiv X_A(0, x) = X_A^0. \quad (6)$$

Концентрації дефектів  $X_v(0, x)$  і  $X_i(0, x)$  дорівнюють концентраціям термодинамічно рівноважного стану перед опроміненням, відповідно  $X_v^{eq}$  і  $X_i^{eq}$ :

$$X_v(0, x) = X_v^{eq}, \quad X_i(0, x) = X_i^{eq}, \quad (7)$$

де

$$X_v^{eq} = \exp\left(\frac{S_v^f}{k_b}\right) \exp\left(-\frac{E_{Bv}^f}{k_b T}\right), \quad (8)$$

$$X_i^{eq} = \exp\left(-\frac{E_{Bi}^f}{k_b T}\right), \quad (9)$$

$S_v^f$  – ентропія формування вакансій,  $E_{Bv}^f$  – енергія формування вакансій елемента В,  $E_{Bi}^f$  – енергія формування міжвузельних атомів елемента В.

Гранична умова при  $x = 0$  для точкових дефектів така:

$$\frac{\partial X_v(t, x)}{\partial t} \Big|_{x=0} = \frac{\partial X_i(t, x)}{\partial t} \Big|_{x=0} = 0, \quad (10)$$

а в площині симетрії півки ( $x = 1/2$ ) вважаємо, що градієнти всіх концентрацій дорівнюють нулю:

$$\frac{\partial X_A(t, x)}{\partial x} \Big|_{x=1/2} = \frac{\partial X_v(t, x)}{\partial x} \Big|_{x=1/2} = \frac{\partial X_i(t, x)}{\partial x} \Big|_{x=1/2} = 0. \quad (11)$$

Для концентрації  $X_A(t, x)$  задаємо інтегральне співвідношення, яке випливає з закону збереження речовини:

$$\int_0^{1/2} X_A(t, x) dx = \frac{1}{2} X_A^0. \quad (12)$$

Співвідношення (12) відіграє роль граничної умови для компоненту сплаву А при  $x = 0$ .

### Числове розв'язання рівнянь

Замінімо просторові похідні концентрацій за допомогою процедури дискретизації у звичайний спосіб.



Шукані концентрації обчислюються в вузлах просторової сітки  $x_n = n\Delta x$  ( $n=0,1,\dots,N$ ), де  $\Delta x$  – просторовий крок.

Першу та другу просторові похідні апроксимуємо скінченними різницями, причому для першої похідної виберемо центральну різницю:  $\frac{dX_j}{dx} = \frac{X_{j+1} - X_{j-1}}{2 \cdot \Delta x}$ ,  $\frac{d^2 X_j}{dx^2} = \frac{X_{j+1} - 2X_j + X_{j-1}}{\Delta x^2}$ .

Вводимо безрозмірні коефіцієнти дифузії

$$d_{kl}^* = \frac{T \cdot d_{kl}}{L^2}, \quad (13)$$

де індекси  $k = A$  або  $B$ , а  $l = v$  або  $i$ ,  $T = D/K_0$ ,  $D$  – доза опромінення,  $L = \frac{1}{2} + \frac{\Delta x}{2}$ ,  $\Delta x = \frac{L}{N+1}$ , а також безрозмірний час  $\tau = \frac{t}{T}$ . Змінимо концентрації дефектів таким чином, щоб їх значення стали одного порядку з концентраціями компонентів  $X_A$ ,  $X_B$ :

$$V = d_{Av}^* \cdot X_v, \quad (14)$$

$$I = d_{Ai}^* \cdot X_i. \quad (15)$$

Остаточно одержимо систему рівнянь для часової еволюції концентрацій, яка є жорсткою [23, 24] через велику різницю парціальних коефіцієнтів дифузії.

Часова еволюція концентрацій матеріалу А визначається такими рівняннями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial X_{Aj}}{\partial \tau} = & \frac{(\alpha-1)(N+1)^2}{4} [X_{Aj+1}V_{j+1} - X_{Aj-1}V_{j+1} - X_{Aj+1}V_{j-1} + X_{Aj-1}V_{j-1}] \\ & + \frac{(\alpha+1)}{4} (N+1)^2 [X_{Aj+1}I_{j+1} - X_{Aj-1}I_{j+1} - X_{Aj+1}I_{j-1} + X_{Aj-1}I_{j-1}] \\ & + \alpha(N+1)^2 [X_{Aj+1}V_j - 2X_{Aj}V_j + X_{Aj-1}V_j] + \alpha(N+1)^2 [X_{Aj+1}I_j - 2X_{Aj}I_j + X_{Aj-1}I_j] \\ & - (N+1)^2 [X_{Aj}V_{j+1} - 2X_{Aj}V_j + X_{Aj}V_{j-1}] + (N+1)^2 [X_{Aj}I_{j+1} - 2X_{Aj}I_j + X_{Aj}I_{j-1}], \end{aligned} \quad (16)$$

де  $j = 1, 2, \dots, N$ . Часова еволюція концентрацій вакансій визначається подібними рівняннями з додаванням членів, які описують швидкість продукування дефектів та швидкість рекомбінацій:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_j}{\partial \tau} = & \frac{(1-\alpha)(N+1)^2}{4} (d_{Av}^* - d_{Bv}^*) [X_{Aj+1}V_{j+1} - X_{Aj-1}V_{j+1} - X_{Aj+1}V_{j-1} + X_{Aj-1}V_{j-1}] \\ & + (d_{Av}^* - d_{Bv}^*) (N+1)^2 [X_{Aj}V_{j+1} - 2X_{Aj}V_j + X_{Aj}V_{j-1}] + d_{Bv}^* (N+1)^2 [V_{j+1} - 2V_j + V_{j-1}] \\ & - \alpha(N+1)^2 (d_{Av}^* - d_{Bv}^*) [X_{Aj+1}V_j - 2X_{Aj}V_j + X_{Aj-1}V_j] + d_{Av}^* D \\ & - \frac{4\pi r_{iv} L^2}{\Omega d_{Ai}^*} [(d_{Av}^* - d_{Bv}^* + d_{Ai}^* - d_{Bi}^*) X_{Aj} + d_{Bv}^* + d_{Bi}^*] V_j I_j. \end{aligned} \quad (17)$$

Часова еволюція концентрацій міжвузельних атомів визначається аналогічними рівняннями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_j}{\partial \tau} = & \frac{(\alpha+1)(N+1)^2}{4} (d_{Ai}^* - d_{Bi}^*) [X_{Aj+1}I_{j+1} - X_{Aj-1}I_{j+1} - X_{Aj+1}I_{j-1} + X_{Aj-1}I_{j-1}] \\ & + (d_{Ai}^* - d_{Bi}^*) (N+1)^2 [X_{Aj}I_{j+1} - 2X_{Aj}I_j + X_{Aj}I_{j-1}] + d_{Bi}^* (N+1)^2 [I_{j+1} - 2I_j + I_{j-1}] \\ & + \alpha(N+1)^2 (d_{Ai}^* - d_{Bi}^*) [X_{Aj+1}I_j - 2X_{Aj}I_j + X_{Aj-1}I_j] + d_{Ai}^* D \\ & - \frac{4\pi r_{iv} L^2}{\Omega d_{Av}^*} [(d_{Av}^* - d_{Bv}^* + d_{Ai}^* - d_{Bi}^*) X_{Aj} + d_{Bv}^* + d_{Bi}^*] V_j I_j. \end{aligned} \quad (18)$$

Числове інтегрування одержаної системи рівнянь проведено за допомогою пакету прикладних програм MATLAB з використанням програмного коду ode15s. При моделюванні використані значення параметрів, які наведені в літературних джерелах (Таблиця). Відмітимо, що даний комп'ютерний код можна поширити на багатокомпонентні сплави [16, 20, 25], додавши один, два і т.д. закони збереження для компонентів.

Таблиця

Вхідні параметри

Визначення	Символ	Значення	Посилання
Енергія формування міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^f$	5,0 eВ	[26]
Енергія формування вакансій Fe	$E_{Fe,v}^f$	1,6 eВ	[27]
Енергія міграції міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^m$	0,35 eВ	[28]
Енергія міграції вакансій Fe	$E_{Fe,v}^m$	0,625 eВ	[28, 29]
Передекспоненціальний фактор дифузії міжвузельних атомів в Fe	$d_{0Fe,i}$	$6,59 \times 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$	[30]
Передекспоненціальний фактор дифузії вакансій Fe	$d_{0Fe,v}$	$5,92 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$	[30]
Енергія міграції міжвузельних атомів Cr	$E_{Cr,i}^m$	0,28 eВ	[28]
Енергія міграції вакансій Cr	$E_{Cr,v}^m$	0,55 eВ	[28]
Передекспоненціальний фактор дифузії міжвузельних атомів Cr	$d_{0Cr,i}$	$6,85 \times 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$	[30]
Передекспоненціальний фактор дифузії вакансій Cr	$d_{0Cr,v}$	$5,46 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$	[30]
Ентропія формування вакансій	$S_v^f$	1,0 $k_b$	[31]
Термодинамічний фактор	$\alpha$	1,0	

Чутливість моделі

Чутливість моделі будемо визначати як похідну  $\partial X / \partial p$  концентрації Cr на межі півки від вхідного параметра  $p$  (див. табл.) [28, 29, 31], яку можна апроксимувати наступним чином:

$$\frac{\partial X}{\partial p} \approx \frac{\delta X}{\delta p} = \frac{X' - X_{reference}}{p' - p_{reference}}, \tag{19}$$

де  $X_{reference}$  – концентрація Cr на поверхні півки, що розраховується при  $p_{reference}$ ,  $X'$  – концентрація Cr на поверхні півки, що розраховується при  $p'$  ( $|X' - X_{reference}| \ll X_{reference}$ ,  $|p' - p_{reference}| \ll p_{reference}$ ).

Від чутливості зручно перейти до значущості,  $S_p^X$ , яка є відносною зміною розрахованої концентрації Cr на поверхні півки по відношенню до відносної зміни вхідного параметра:

$$S_p^X = \frac{X' - X_{reference}}{p' - p_{reference}} \cdot \frac{p_{reference}}{X_{reference}}. \tag{20}$$

Зрозуміло, що концентрація Cr на поверхні півки найбільш чутлива до тих параметрів, які мають найбільшу значущість.

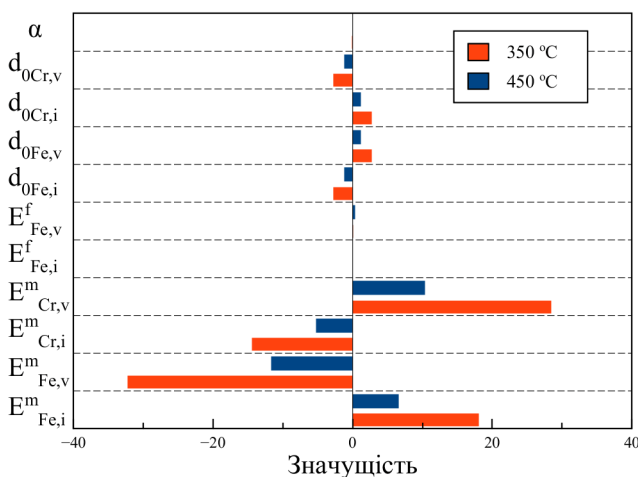


Рис. 1. Результати аналізу чутливості даної моделі

Значущість була розрахована шляхом моделювання опромінювання сплаву Fe-9Cr до дози 1 зна для двох температур 350°C та 450°C при швидкості продукування дефектів  $10^{-5}$  зна $\cdot$ с $^{-1}$ . Зауважимо, що на відміну від дозиметрії, де використовується в якості одиниці вимірювання дози 1 Грей, в фізиці радіаційних ушкоджень використовується одиниця дози в 1 зна (зміщень на атом). Це пов'язано з тим, що в радіаційному матеріалознавстві головним результатом опромінювання матеріалу є зміщення атомів матеріалу з вузлів ґратки. Результати розрахунків подані на рис. 1. Концентрація Cr на поверхні півки найбільш чутлива до енергій міграцій вакансій і міжвузельних атомів Fe та Cr. Підвищення температури призводить до суттєвого зменшення значущості параметрів, що, ймовірно, викликано збільшенням зворотної дифузії.

**РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ**

Проведено моделювання опромінювання плівки Fe-8.3мас. %Cr та плівки Fe-9мас. %Cr до дози 1 зна за сталої швидкості продукування дефектів  $10^{-5}$  зна/с, товщини 300 нм і температури 400°C. Розраховані профілі концентрації Cr порівнюються з експериментально одержаними на межах зерен у сплавах T91 (рис. 2) та Fe-9мас. %Cr (рис. 3) [13], відповідно. Як було вказано в постановці задачі, профіль концентрації Cr був розрахований для лівої половини плівки ( $0 \leq x \leq 1/2$ ). Для співставлення з експериментом праву частину розрахованого профілю Cr ( $1/2 \leq x \leq 1$ ), який є дзеркально симетричним відносно площини  $x = 1/2$ , ми розмістили з лівого боку від міжзеренної межі. Розрахований профіль концентрації сплаву Fe-8.3мас. %Cr задовільно узгоджується з експериментальним. Одержана величина збагачення Cr у сплаві Fe-9мас. %Cr більша за експериментальну, що пов'язано з тим, що енергії міграції точкових дефектів Fe та Cr змінюються зі зміною концентрації Cr в сплавах Fe-Cr [3, 28, 32].

**Залежність від дози. Стаціонарний стан**

На рис. 4 наведені залежності концентрації Cr від відстані до поверхні для плівки Fe-9ат. %Cr товщиною 300 нм за сталої швидкості продукування дефектів  $10^{-5}$  зна/с та температури 400°C. Ці залежності відрізняються дозами опромінення, а саме  $10^{-3}$  зна,  $10^{-2}$  зна,  $10^{-1}$  зна і 1 зна. Зі збільшенням дози криві прямують до верхньої з зображених кривих – стаціонарного стану, який для заданих умов настає при дозі опромінення, рівній 1 зна. В процесі опромінення крутизна профілю концентрації Cr зменшується, значення збагачення Cr збільшується.

Характерною особливістю стаціонарного стану є рівність нулю потоків компонентів та рівність потоків вакансій потокам міжвузельних атомів для кожної точки простору. Для цього стану, як можна показати, градієнт концентрації компонента А пов'язаний з градієнтом концентрації вакансій таким співвідношенням [13]:

$$\nabla X_A = \frac{X_A X_B d_{Bv} d_{Bi}}{\alpha (d_{Bi} X_B (d_{Av} X_v + d_{Ai} X_i) + d_{Ai} X_A (d_{Bv} X_v + d_{Bi} X_i))} \left( \frac{d_{Av}}{d_{Bv}} - \frac{d_{Ai}}{d_{Bi}} \right) \nabla X_v. \quad (21)$$

З рівності (21) випливає, що збагачення чи збіднення компонента А визначається знаком різниці відношень коефіцієнтів дифузії за вакансійним механізмом ( $d_{Av}/d_{Bv}$ ) та міжвузельним механізмом ( $d_{Ai}/d_{Bi}$ ). Наприклад, якщо  $d_{Ai}/d_{Bi} > d_{Av}/d_{Bv}$ , то на поверхні буде спостерігатися збагачення компонента А.

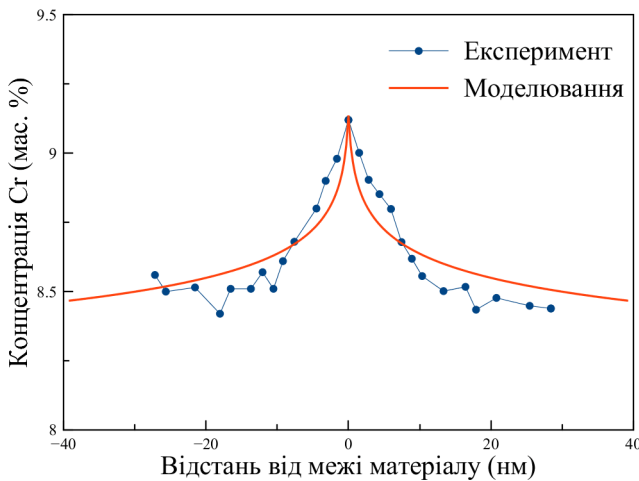


Рис. 2. Експериментальний профіль концентрації Cr в залежності від відстані до межі зерна у сплаві T91, який опромінений до дози 1 зна при температурі 400°C та швидкості продукування дефектів  $1,2 \cdot 10^{-5}$  зна/с [13] – синя крива, та модельований профіль концентрації Cr у плівці Fe-8.3мас. %Cr товщиною 300 нм за тих же умов – червона крива

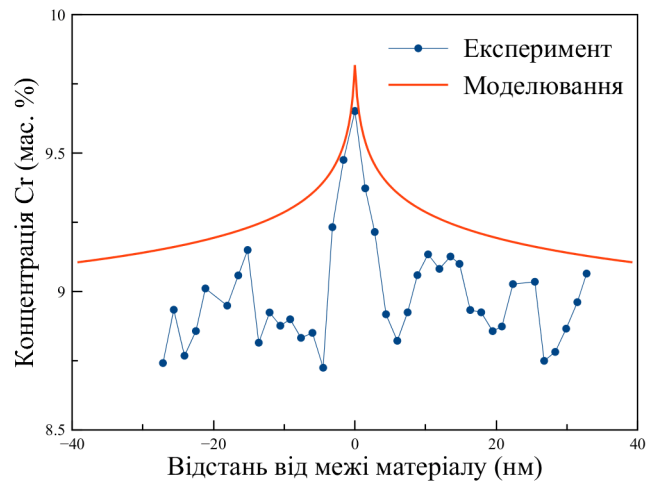


Рис. 3. Експериментальний профіль концентрації Cr в залежності від відстані до межі зерна у сплаві Fe-9мас. %Cr, який опромінений до дози 1 зна при температурі 400°C та швидкості продукування дефектів  $1,2 \cdot 10^{-5}$  зна/с [13] – синя крива, та модельований профіль концентрації Cr у плівці Fe-9мас. %Cr товщиною 300 нм за тих же умов – червона крива

**Залежності збагачення Cr від температури, товщини плівки та швидкості продукування дефектів**

Розглянемо дві моделі: поточну модель з термодинамічно рівноважними граничними умовами та модель абсолютно чорних стоків дефектів (АЧСД), в якій концентрації вакансій та міжвузельних атомів в безпосередній близькості до стоків рівні нулю [29].

Подамо розраховану залежність збагачення Cr (приріст концентрації Cr на поверхні плівки) від температури для плівки Fe-9ат. %Cr товщиною 300 нм при дозі 1 зна за сталої швидкості продукування дефектів  $10^{-5}$  зна/с для термодинамічно рівноважної моделі і моделі АЧСД рис. 5.

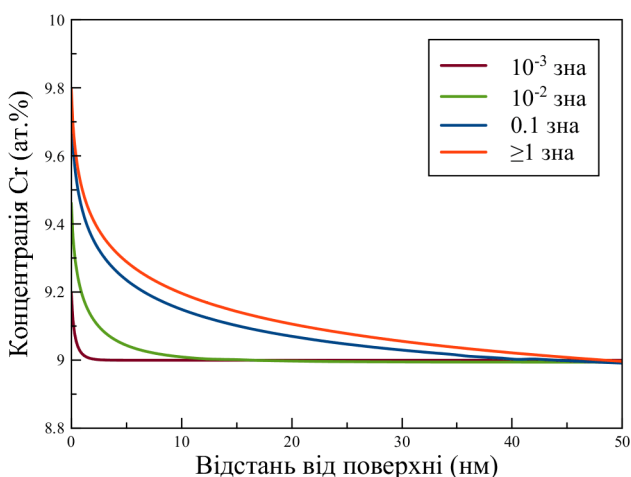


Рис. 4. Профілі концентрації Cr в процесі опромінювання до досягнення стаціонарного стану.

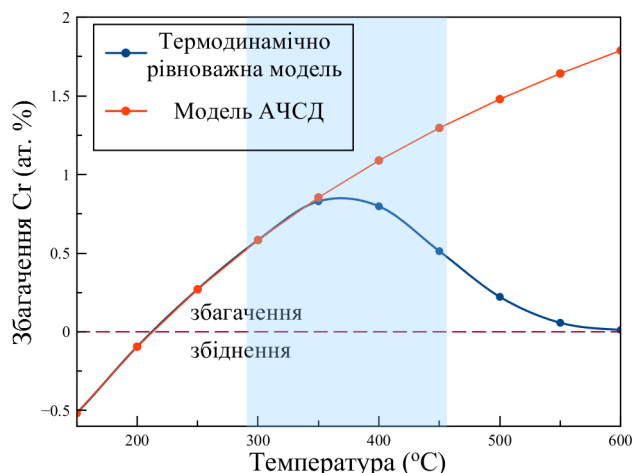


Рис. 5. Залежність збагачення Cr від температури

Оскільки при температурі  $T=211^{\circ}\text{C}$  вираз  $\frac{d_{Av}}{d_{Bv}} - \frac{d_{Ai}}{d_{Bi}}$  в формулі (21) змінює знак, це означає, що має місце

перехід від збіднення Cr до збагачення Cr на поверхні півки. При температурі  $370^{\circ}\text{C}$  для моделі з термодинамічно рівноважними граничними умовами спостерігається максимум збагачення Cr як функції температури. Зі збільшенням температури збагачення Cr зменшується до нуля, що пояснюється зростанням термодинамічно рівноважних значень концентрацій точкових дефектів, а отже і зростанням зворотної дифузії. Заштрихована область відповідає діапазону температур, для якого збагачення Cr задовільно узгоджується з експериментальним ( $\approx 300^{\circ}\text{C} - 450^{\circ}\text{C}$ ). Стосовно моделі АЧСД можна стверджувати, що зі збільшенням температури  $T$  зростає коефіцієнт рекомбінації, внаслідок чого приріст збагачення Cr зменшується.

Для одержання залежності збагачення Cr від товщини півки проведено моделювання опромінювання півок Fe-9ат. %Cr різної товщини до дози 1 зна за сталої швидкості продукування дефектів  $10^{-5}$  зна/с та температури  $400^{\circ}\text{C}$  для термодинамічно рівноважної моделі і моделі АЧСД. Результати моделювання представлені на рис. 6.

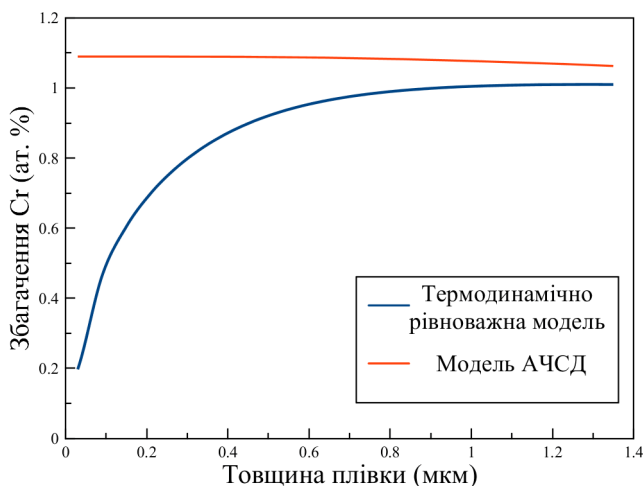


Рис. 6. Залежність збагачення Cr від товщини півки

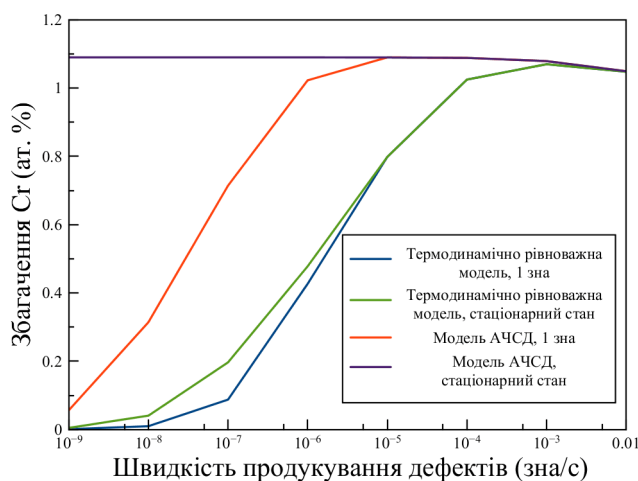


Рис. 7. Залежність збагачення Cr від швидкості продукування дефектів

У випадку термодинамічно рівноважної моделі збільшення товщини півки приводить до збільшення збагачення Cr, що пов'язано зі збільшенням кількості продукованих дефектів, які переносяться до поверхні. Як видно з рис. 6, при малих товщинах півки приріст збагачення Cr відносно значний, в подальшому цей приріст сповільнюється, що, ймовірно, пов'язано з тим, що рушійні сили дифузії (пропорційні градієнтам концентрації) можуть забезпечити лише певну максимальну швидкість процесу. В моделі АЧСД збагачення Cr слабо залежить від товщини півки, незначно зменшуючись зі збільшенням товщини (див. рис. 6).

На рис. 7 наведена залежність збагачення Cr від швидкості продукування дефектів півки Fe-9ат. %Cr товщиною 300 нм при дозі 1 зна і стаціонарному стані за температури  $400^{\circ}\text{C}$  для термодинамічно рівноважної моделі та моделі АЧСД.

В термодинамічно рівноважній моделі спостерігається максимум збагачення Cr як функція швидкості продукування дефектів  $K_0$ , оскільки має місце конкуренція двох процесів: збільшення відносної концентрації дефектів  $(X_{i,v} - X_{i,v}^{eq})$  приводить до збільшення збагачення Cr, а збільшення коефіцієнта рекомбінації  $R$  приводить до зменшення збагачення Cr (зелена крива на рис. 7, яка демонструє максимум при  $K_0 = 10^{-3}$ ). Для моделі АЧСД при досягненні стаціонарного стану спостерігається зменшення збагачення Cr зі збільшенням  $K_0$  за рахунок збільшення  $R$ . Як впливає з наших розрахунків, доза опромінення, за якої настає стаціонарний стан, зменшується зі збільшенням швидкості продукування дефектів (рис. 7).

Розраховані нами залежності збагачення Cr від температури та швидкості продукування дефектів подібні до опублікованих раніше [15, 20, 28, 29]. Залежність збагачення Cr від товщини плівки розглядається вперше.

### ВИСНОВКИ

На базі пакету прикладних програм MATLAB розроблений комп'ютерний код для чисельного розв'язку системи диференціальних рівнянь, які описують радіаційно-індуковану сегрегацію в бінарних сплавах. В результаті моделювання були одержані концентраційні профілі Cr в сплавах Fe-Cr при різних дозах опромінення, температурах, товщинах плівки і швидкостях продукування точкових дефектів та побудовані залежності збагачення Cr від температури, товщини плівки і швидкості продукування дефектів для термодинамічно рівноважної моделі та моделі АЧСД. Для стаціонарного стану знак збагачення компоненту А збігається зі знаком різниці відношень коефіцієнтів дифузії за міжвузельним механізмом та вакансійним механізмом  $(d_{Ai}/d_{Bi} - d_{Av}/d_{Bv})$ .

Проведений аналіз чутливості обраної моделі від вхідних параметрів показав, що сегрегація найбільш суттєво залежить від енергій міграції вакансій та міжвузельних атомів Fe та Cr. Підвищення температури призводить до зменшення значущості параметрів.

Як показує порівняння розрахованих профілів концентрації Cr з експериментально одержаними, використана модель задовільно описує процес радіаційно-індукованої сегрегації в двокомпонентних сплавах Fe-Cr при дозах опромінення нижчих 1 зна та температурах від 300°C до 450°C.

Одержані результати є складовою частиною наукової роботи №217-16 (договір №К-3-54/2016 на виконання наукової роботи) РК 0116U002993 «Дослідження радіаційних дефектів та радіаційно-індукованої сегрегації домішок в сплавах цирконію під дією опромінення іонами з використанням методів ядерного мікроаналізу» (науковий керівник – академік НАН України, професор Сторіжко В.Ю.)

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Buckthorpe D. Introduction to Generation IV nuclear reactors // In Woodhead Publishing Series in Energy: N.106. Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors / Ed. by P. Yvon – Amsterdam: Elsevier Ltd., 2017. – P. 1-22.
2. Aitkaliyeva A., He L., Wen H., Miller B., Bai X.M., Allen T. Irradiation effects in Generation IV nuclear reactor materials // In Woodhead Publishing Series in Energy: N.106. Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors / Ed. by P. Yvon – Amsterdam: Elsevier Ltd., 2017. – P. 253-283.
3. Choudhury S., Barnard L., Tucker J.D., Allen T.R., Wirth B.D., Asta M., Morgan D. Ab-initio based modeling of diffusion in dilute bcc Fe-Ni and Fe-Cr alloys and implications for radiation induced segregation // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 411. – P. 1-14.
4. Lu Z., Faulkner R.G., Was G., Wirth B.D. Irradiation-induced grain boundary chromium microchemistry in high ferritic steels // Scr. Mater. – 2008. – Vol. 58. – P. 878-881.
5. Takahashi H., Ohnuki S., Takeyama T. Radiation-induced segregation at internal sinks in electron irradiated binary alloys // J. Nucl. Mater. – 1981. – Vol. 103-104. – P. 1415-1420.
6. Little E.A., Morgan T.S., Faulkner R.G. Microchemistry of neutron irradiated 12%CrMoVNb martensitic steel // Mater. Sci. Forum. – 1992. – Vol. 97-99 – P. 323-328.
7. Neklyudov I.M., Voyevodin V.N. Features of structure-phase transformations and segregation processes under irradiation of austenitic and ferritic-martensitic steels // J. Nucl. Mater. – 1994. – Vol. 212-215. – P. 39-44.
8. Schaeublin R., Spatig P., Victoria M. Chemical segregation of the low activation ferritic/martensitic steel F82H // J. Nucl. Mater. – 1998. – Vol. 263. – P. 1350-1355.
9. Gupta G., Jiao Z., Ham A.N., Busby J.T., Was G.S. Microstructural evolution of proton irradiated T91 // J. Nucl. Mater. – 2006. – Vol. 351. – P. 162-173.
10. Lu Z., Faulkner R.G., Sakaguchi N., Kinoshita H., Takahashi H., Flewitt P.E.J. Effect of hafnium on radiation-induced intergranular segregation in ferritic steel // J. Nucl. Mater. – 2006. – Vol. 351. – P. 155-161.
11. Marquis E.A., Lozano-Perez S., de Castro V. Effects of heavy-ion irradiation on the grain boundary chemistry of an oxide-dispersion strengthened Fe-12 wt.% Cr alloy // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 417. – P. 257-261.
12. Marquis E.A., Hu R., Rousseau T., A systematic approach for the study of radiation-induced segregation/depletion at grain boundaries in steel // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 413. – P. 1-4.
13. Wharry J.P., Was G.S. A systematic study of radiation-induced segregation in ferritic-martensitic alloys // J. Nucl. Mater. – 2013. – Vol. 442. – P. 7-16.

14. Okamoto P.R., Rehn L.E. Radiation-induced segregation in binary and ternary alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 2-23.
15. Wiedersich H., Okamoto P.R., Lam N.Q. A theory of radiation-induced segregation in concentrated alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 98-108.
16. Watanabe S., Takahashi H. Discriminant of RIS in multi-component alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 208. – P. 191-194.
17. Marwick A.D. Calculation of bias due to solute redistribution in an irradiated binary alloy: surfaces of a thin foil // *J. Nucl. Mater.* – 1985. – Vol. 135. – P. 68-76.
18. Voyerodin V.N., Neklyudov I.M. Evolution of the structure phase state and radiation resistance of structural materials. – Kiev: Naukova dumka, 2006. – 376 p. (in Russian)
19. Voyerodin V.N. Structural materials of nuclear power – challenge to 21 century // *Problems of Atomic Science and Technology.* – 2007. – Vol. 90. – P. 10-22. (in Russian)
20. Was G.S. *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys.* – New York: University of Michigan, Springer, 2007. – 828 p.
21. Was G.S., Wharry J.P., Frisbie B., Wirth B.D., Morgan D., Tucker J.D., Allen T.R. Assessment of radiation-induced segregation mechanisms in austenitic and ferritic-martensitic alloys // *J. Nucl. Mater.* – 2011. – Vol. 411. – P. 41-50.
22. Xu D., Wirth B.D., Li M., Kirk M.A. Combining in situ transmission electron microscopy irradiation experiments with cluster dynamics modeling to study nanoscale defect agglomeration in structural metals // *Acta Mater.* – 2012. – Vol. 60. – P. 4286-4302.
23. Hairer E., Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems.* – 2nd edn. – Berlin, Springer, 1996. – 614 p.
24. Shampine L.F., Reichelt M.W. The MATLAB ODE suite // *SIAM J. Sci. Comput.* – 1997. – Vol. 18. – No. 1. – P. 1-22.
25. Koropov O.V. Differential equations of radiation-induced segregation in five-component metal alloys // *Proc. of Eighteenth International Scientific Mykhailo Kravchuk Conference, October 7-10, 2017, Kyiv: Vol. 1.* – Kyiv: NTUU “KPI”, 2017. – P. 86 - 90. (in Ukrainian)
26. Olsson P., Domain C., Wallenius J. Ab initio study of Cr interactions with point defects in bcc Fe // *Phys Rev B.* – 2007. – Vol. 75. – P. 014110.
27. Schaefer H.-E., Maier K., Weller M., Herlach D., Seeger A., Diehl J. Vacancy formation in iron investigated by positron annihilation in thermal equilibrium // *Scripta Metallurgica.* – 1977. – Vol. 11. – P. 803-809.
28. Wharry J.P., Was G.S. The mechanism of radiation-induced segregation in ferritic-martensitic alloys // *Acta Mater.* – 2014. – Vol. 65. – P. 42-55.
29. Selby A.P. *Modeling Radiation-Induced Segregation in Ferritic-Martensitic Steels.* Master’s Thesis. – University of Tennessee, 2015.
30. Field K.G., Barnard L.M., Parish C.M., Busby J.T., Morgan D., Allen T.R. Dependence on grain boundary structure of radiation induced segregation in a 9 wt.% Cr model ferritic/martensitic steel // *J. Nucl. Mater.* – 2013. – Vol. 435. – P. 172-180.
31. Allen T.R., Was G.S. Modeling radiation-induced segregation in austenitic Fe-Cr-Ni alloys // *Acta Mater.* – 1998. – Vol. 46. – No. 10. – P. 3679-3691.
32. Terentyev D., Olsson P., Klaver T.P.C., Malerba L. On the migration and trapping of single self-interstitial atoms in dilute and concentrated Fe-Cr alloys: Atomistic study and comparison with resistivity recovery experiments // *Computational Materials Science.* – 2008. – Vol. 43. – P. 1183-1192.

PACS: 62.20.Dc, 63.20.Ry

## REDUCED ISOTROPIC CRYSTAL MODEL WITH RESPECT TO THE FOURTH-ORDER ELASTIC MODULI

**O. Burlayenko, V. Khodusov, A. Naumovets**

*Kharkov V.N. Karazin National University*

*Sq. Svobody 4, Kharkov, 61022, Ukraine*

*E-mail: [vkhodusov@ukr.net](mailto:vkhodusov@ukr.net)*

Received March 1, 2018

Using a reduced isotropic crystal model the relationship between the fourth-order elastic moduli of an isotropic medium and the independent components of the fourth-order elastic moduli tensor of real crystals of various crystal systems is found. To calculate the coefficients of these relations, computer algebra systems Redberry and Mathematica for working with high order tensors in the symbolic and explicit form were used, in light of the overly complex computation. In an isotropic medium, there are four independent fourth order elastic moduli. This is due to the presence of four invariants for an eighth-rank tensor in the three-dimensional space, that has symmetries over the pairs of indices. As an example, the moduli of elasticity of an isotropic medium corresponding to certain crystals of cubic system are given (LiF, NaCl, MgO, CaF<sub>2</sub>). From the obtained results it can be seen that the reduced isotropic crystal model can be most effectively applied to high-symmetry crystal systems.

**KEY WORDS:** fourth order elastic moduli, cubic crystal system, isotropic crystal, phonon interaction

### МОДЕЛЬ ЗВЕДЕНОГО ІЗОТРОПНОГО КРИСТАЛА ВІДНОСНО МОДУЛІВ ПРУЖНОСТІ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКУ

**О. Бурлаєнко, В. Ходусов, А. Наумовець**

*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна*

*пл. Свободи, 4, м. Харків, 61022, Україна*

У статті за допомогою моделі зведеного ізотропного кристала знайдений зв'язок модулів пружності четвертого порядку ізотропного середовища з незалежними компонентами тензора модулів пружності четвертого порядку реальних кристалів різних сингоній. Для розрахунку коефіцієнтів, що задають ці зв'язки, використовувалися системи комп'ютерної алгебри по роботі з тензорами вищих порядків в символічному і явному вигляді Redberry і Mathematica, зважаючи на значну громіздкість обчислень. В ізотропному середовищі є чотири незалежних модулів пружності четвертого поряд. Це пов'язано з наявністю чотирьох інваріантів у тензора восьмого рангу в тривимірному просторі, який має симетрії по парам індексів. Як приклад наведено модулі пружності ізотропного середовища, що відповідає деяким кристалом кубічної сингонії (LiF, NaCl, MgO, CaF<sub>2</sub>). З отриманих результатів видно, що модель зведеного ізотропного кристала може бути найбільш ефективно застосована для кристалів сингоній високих симетрій.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** модулі пружності четвертого порядку, кубічна сингонія, ізотропний кристал, взаємодія фононів

### МОДЕЛЬ ПРИВЕДЕННОГО ИЗОТРОПНОГО КРИСТАЛЛА ОТНОСИТЕЛЬНО МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА

**А. Бурлаєнко, В. Ходусов, А. Наумовець**

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина*

*пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина*

В статье с использованием модели приведенного изотропного кристалла найдена связь модулей упругости четвертого порядка изотропной среды с независимыми компонентами тензора модулей упругости четвертого порядка реальных кристаллов различных сингоний. Для расчета коэффициентов задающих эти связи использовались системы компьютерной алгебры по работе с тензорами высших порядков в символьном и явном виде Redberry и Mathematica, ввиду крайней громоздкости вычислений. В изотропной среде имеется четыре независимых модуля упругости четвертого порядка. Это связано с наличием четырех инвариантов у тензора восьмого ранга в трехмерном пространстве, обладающего симметриями по парам индексов. В качестве примера приведены модули упругости изотропной среды соответствующей некоторым кристаллам кубической сингонии (LiF, NaCl, MgO, CaF<sub>2</sub>). Из полученных результатов видно, что модель приведенного изотропного кристалла наиболее эффективно работает для кристаллов сингоний высоких симметрий.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** модули упругости четвертого порядка, кубическая сингония, изотропный кристалл, взаимодействие фононов

There exist some physical phenomena in crystals that cannot be described without taking into account the interaction of phonons with each other. In particular, the thermal expansion of a solids, the kinetic phenomena of thermal conductivity, the viscosity etc. can be related to such cases. If one takes into consideration these interactions for real crystals, significant difficulties occur.

As low-frequency phonon oscillations play the main role in the abovementioned phenomena in a solid, it is possible to use the macroscopic theory of elasticity. In this model, a crystal is replaced by the continuous medium possessing the symmetry of the crystal lattice [1].

The purpose of this paper is to calculate the fourth order elastic coefficients of an isotropic medium, that corresponds most closely to a real crystal, in relation to its elastic properties. These coefficients are needed to explanation of nonlinear phenomena in solids.

### JUSTIFICATION FOR THE MODEL

The free energy is represented as an expansion in terms of a small strain tensor as follows:

$$F = F_0 + \frac{1}{2} \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{6} \lambda_{ijklmn} u_{ij} u_{kl} u_{mn} + \frac{1}{24} \lambda_{ijklmnpq} u_{ij} u_{kl} u_{mn} u_{pq},$$

where  $u_{ik} = \frac{1}{2} (\nabla_i u_k + \nabla_k u_i + \nabla_i u_l \nabla_k u_l)$  - strain tensor,  $\lambda_{ijkl}$ ,  $\lambda_{ijklmn}$ ,  $\lambda_{ijklmnpq}$  are the tensors of elastic moduli of the 4th, 6th and 8th rank, respectively.

If solid is considered as an isotropic medium, the thermodynamic and kinetic coefficients are calculated most simply. Some attempts to reduce the real crystal to an isotropic medium were first done within the Debye model and, then, was developed in the theory of elasticity [2]. For this sake, the second order elastic moduli  $\lambda$  and  $\mu$  and the third order elastic moduli A, B and C were used. A model of an isotropic crystal with elastic properties closest to the real one was suggested in the work [3]. According to the paper [4], we will call this model a reduced isotropic crystal model (RICM) with respect to the elastic moduli. Also, a procedure of calculating of the elastic moduli of the reduced isotropic crystal through the elastic moduli of the real crystal was described there. It turns out that RICM corresponds most of all to a real crystal not only with respect to the elastic waves that propagate in it, but also to any elastic properties in general. The use of this model for the second and third order elastic moduli for calculation of the Debye's temperature and for calculation of phonon viscosity and thermal conductivity yields a result which is in a good agreement with the experiment [4].

However, it is still necessary to take into account the fourth order elastic moduli (FOEM) in the reduced isotropic crystal model for calculations of the Grüneisen parameter of a real crystal and the influence of the phonons interaction on the thermodynamic properties of crystals [5]. In the case of an isotropic medium the tensor of elastic moduli of the 8th rank has 4 independent components D, E, F, G [6].

Using a minimization procedure for the expression  $|\lambda_{ijklmnpqt}^{(Re)} - \lambda_{ijklmnpqt}^{(0)}|^2$  by D, E, F, G, one may obtain their connection with FOEM of a real crystal. Here  $\lambda_{ijklmnpqt}^{(0)}$  is the 8th rank tensor of elastic moduli of an isotropic medium, the explicit form of which is given in [5]. It has four invariants [7]. The expansion into a series of the free energy of a crystal includes a convolution of FOEM tensor with the product of four strain tensors. This convolution is expressed by  $\lambda_{ijklmnpqt}^{(0)}$  invariants, that is why isotropic medium has four FOEC.

After the appropriate minimization procedure, we obtain the following expressions:

$$D = \frac{1}{56700} (1123 \lambda_{iikkllpp} - 618 \lambda_{iikkllpl} - 2296 \lambda_{iikkllpk} - 1671 \lambda_{iikkilpl} + 3522 \lambda_{iikkllpi});$$

$$E = \frac{1}{113400} (-103 \lambda_{iikkllpp} + 438 \lambda_{iikkllpl} + 376 \lambda_{iikkllpk} + 411 \lambda_{iikkilpl} - 1002 \lambda_{iikkllpi});$$

$$F = \frac{1}{226800} (-287 \lambda_{iikkllpp} + 282 \lambda_{iikkllpl} + 1184 \lambda_{iikkllpk} + 39 \lambda_{iikkilpl} - 978 \lambda_{iikkllpi});$$

$$G = \frac{1}{226800} (-557 \lambda_{iikkllpp} + 822 \lambda_{iikkllpl} + 104 \lambda_{iikkllpk} + 2469 \lambda_{iikkilpl} - 2598 \lambda_{iikkllpi});$$

There is a sum from 1 to 3 over the repeated indices.

We shall carry out calculations for crystal systems of the highest symmetries as they have lower degree of anisotropy and are closer to an isotropic medium by their properties. Besides for crystals of these crystal systems, experimentally measured values of FOEM exist, using which one can obtain the elastic moduli of the reduced isotropic crystal. The expressions of coefficients D, E, F, G are given in Table. 1 (in Appendix). To receive values of D, E, F, G from the table, it is necessary to multiply the coefficients in a row by the corresponding values of FOEM  $C_{iklm}$  presented in the matrix form and to sum them up. For example, for crystals of cubic crystal system, we obtain:

$$D = \frac{1}{315} (c_{1111} + 32c_{1112} + 36c_{1122} + 204c_{1123} - 132c_{1144} - 24c_{1166} - 312c_{1244} - 36c_{1266} + 240c_{1456} + 6c_{4444} + 12c_{4466});$$



$$E = \frac{1}{315} (c_{1111} + 14c_{1112} + 9c_{1122} - 3c_{1123} + 21c_{1144} - 6c_{1166} + 48c_{1244} - 48c_{1456} - 3c_{4444} - 6c_{4466});$$

$$F = \frac{1}{630} (2c_{1111} + 10c_{1112} - 9c_{1122} - 24c_{1123} + 6c_{1144} + 6c_{1166} + 78c_{1244} + 36c_{1266} - 6c_{1456} - 15c_{4444} - 30c_{4466});$$

$$G = \frac{1}{630} (2c_{1111} - 8c_{1112} + 27c_{1122} - 42c_{1123} + 96c_{1144} + 24c_{1166} + 60c_{1244} - 54c_{1266} - 168c_{1456} + 39c_{4444} + 78c_{4466}).$$

Let us display the values of the second, third and fourth order elastic moduli, calculated on the basis of RISM model for some crystals of the cubic crystal system in Table. 2 (in Appendix), using experimentally measured elastic moduli given in works [8,9].

Our next task is to analyze the calculated coefficients. In the paper [10] it was shown that from 6561 components of tensor  $\lambda_{klmnpq}^{(Re)}$  much less ones are independent. Let us write out the number of independent components (FOEM) for various crystal system: triclinic ( $1, \bar{1}$ ): 126; tetragonal ( $4mm, \bar{4}2m, 422, 4/m\ 2/m\ 2/m$ ): 25; trigonal ( $3m, 32, \bar{3}2/m$ ): 28; hexagonal ( $\bar{6}2m, 6mm, 622, 6/m2/m2/m$ ): 19; cubic ( $\bar{4}3m, 432, 4/m\ \bar{3}\ 2/m$ ): 11. The number of the independent coefficients included in D, E, F, G of the reduced isotropic crystal for different crystal system are the following: triclinic: 36, tetragonal: 19, trigonal: 19, hexagonal: 13, cubic: 11.

### CONCLUSIONS

A simple comparison of the number FOEM tensor components of a real crystal with those included into coefficients D, E, F, G shows that the model of the reduced isotropic crystal describes rather well the properties of a real crystal, especially for a high symmetry crystal system.

If the values of FOEM are known for a real crystal, then it is possible to determine the values of coefficients D, E, F, G for the model of a reduced isotropic crystal and the matrix elements of interaction of four phonons  $\Phi(1,2,3,4)$ , as well as to calculate to within a number the quantities that characterize various phenomena in crystals for which nonlinear interactions of phonons are essential.

### REFERENCES

1. Tucker J.W. and Rampton V.W. Microwave Ultrasonics in Solid State Physics. – Amsterdam: North Holland, 1972. – 418p.
2. Landau L.D., Lifshitz E.M. Theory of Elasticity. – Oxford: Butterworth-Heinemann, 1986. – 187 p.
3. Fedorov F.I. Theory of Elastic Waves in Crystals. – New York: Plenum Press, 1968. – 375 p.
4. Akhiezer A.I., Aleksin V.F., Khodusov V.D. Gas dynamics of quasi-particles // Low Temp. Phys. – 1994. – Vol.20. – P.939.
5. Poluektov Yu.M. Self-Consistent Description Of Interacting Phonons In A Crystal Lattice // East Eur. J. Phys. – 2016. – Vol. 3. – No.3. – P. 35-46.
6. Krishnamurty T.S.G. Fourth-order Elastic Coefficients in Crystals // Acta Cryst. – 1963. – Vol. 16. – P. 839-840.
7. Destradea M., Ogdenb R.W. On the third- and fourth-order constants of incompressible isotropic elasticity // The Journal of the Acoustical Society of America. – 2010. – Vol. 128. – P. 3334-3343.
8. Garg V.K., Puri D.S., Verma M.P. Many-Body Effects on the Fourth-Order Elastic Constants of Ionic Solids // Phys. Stat. Sol. (b). – 1977. – Vol. 82. – P. 325-334.
9. Goyal S.C., Sharma A.K. Fourth-Order Elastic Constants of Fluorite Structure Solids // Phys. Stat. Sol. (b). – 1988. – Vol. 146. – P. 435-443.
10. Krishnamurty T.S.G., Gopalakrishnamurty P. Elastic coefficients in crystals // Acta Cryst. – 1968. – Vol. 24. – P. 563-565.

APPENDIX

Table 1.

Coefficients for RICM constants D, E, F, G for various crystal systems.

	multipl	C <sub>1111</sub>	C <sub>1112</sub>	C <sub>1113</sub>	C <sub>1122</sub>	C <sub>1123</sub>	C <sub>1133</sub>	C <sub>1144</sub>	C <sub>1155</sub>	C <sub>1166</sub>	C <sub>1223</sub>	C <sub>1233</sub>	C <sub>1244</sub>	C <sub>1255</sub>	C <sub>1266</sub>	C <sub>1333</sub>	C <sub>1344</sub>	C <sub>1355</sub>	C <sub>1366</sub>	C <sub>1456</sub>	C <sub>2233</sub>	C <sub>3333</sub>	C <sub>3344</sub>	C <sub>4444</sub>	C <sub>4466</sub>	C <sub>6666</sub>
tetragonal	D 1/945	2	32	32	36	408	72	-264	-24	-24	-204	-312	-312	-	-	32	-312	-72	-312	480	-	1	-	12	24	-
	E 1/945	2	14	14	9	-6	18	42	-6	-6	-3	48	48	-	-	14	48	-	48	-96	-	1	-	-6	-6	-
	F 1/1890	4	10	10	-9	-48	-18	12	6	6	-24	78	78	-	-	10	78	72	78	-12	-	2	-	-30	-60	-
trigonal	G 1/1890	4	-8	-8	27	-84	54	192	24	24	-42	60	60	-	-	-8	60	-108	60	-336	-	2	-	78	156	-
	D 1/1890	32	-	27	-	416	122	-318	-18	20	413	56	-362	-262	-336	16	-634	-134	-	-	-	2	-48	12	-	-144
	E 1/3780	28	-	39	-	-5	79	102	-18	34	-23	-8	116	76	-192	14	196	-4	-	-	-	4	-24	-12	-	-112
hexagonal	F 1/15120	40	-	63	-	-182	-140	57	27	124	-215	-20	317	307	192	20	625	575	-	-	-	16	48	-120	-	-96
	G 1/7560	26	-	-15	-	-172	248	462	42	56	-169	-46	190	50	-348	-8	256	-446	-	-	-	8	96	156	-	-40
	D 2/945	1	16	16	-	204	36	-132	-12	-12	-	-	-	-	-	16	-156	-36	-	-	36	-	-	6	-	-
cubic	E 2/945	1	7	7	-	-3	9	21	-3	-3	-	-	-	-	-	7	24	-	-	-	9	-	-	-3	-	-
	F 1/945	2	5	5	-	-24	-9	6	3	3	-	-	-	-	-	5	39	36	-	-	-9	-	-	-15	-	-
	G 1/945	2	-4	-4	-	-42	27	96	12	12	-	-	-	-	-	-4	30	-54	-	-	27	-	-	39	-	-
cubic	D 1/315	1	32	-	36	204	-	-132	-	-24	-	-	-312	-	-36	-	-	-	-	240	-	-	-	6	12	-
	E 1/315	1	14	-	9	-3	-	21	-	-6	-	-	48	-	-	-	-	-	-	-48	-	-	-	-3	-6	-
	F 1/630	2	10	-	-9	-24	-	6	-	6	-	-	78	-	36	-	-	-	-	-6	-	-	-	-15	-30	-
	G 1/630	2	-8	-	27	-42	-	96	-	24	-	-	60	-	-54	-	-	-	-	-168	-	-	-	39	78	-

Table 2.

Values of the elastic moduli in RICM

	$10^{11}$ dyn·cm <sup>-2</sup>	$\lambda$	$\mu$	A	B	C	D	E	F	G
LiF	3.4	5.15	-4.14	-9.48	248.5	-7.7	248.5	-73.13	68.7	69.7
NaCl	1.49	1.5	-2.1	-3.3	87.5	-3.3	87.5	-26.8	25.5	25.8
MgO	7.04	13.39	-2.5	-15.3	347.5	-21.6	347.5	-95.7	66.6	73.5
CaF <sub>2</sub>	6.2	4.2	-21.19	-9.87	-13.4	-5.81	-13.4	-3.2	4.30	4.5

PACS: 41.60.-m, 41.90.+e, 42.90.+m, 84.90.+a

## MODEL OF A DIPOLE WITH ATOMIC STRUCTURE

D.O. Vasylenko<sup>1</sup>, V.S. Sydorenko<sup>1</sup>, P.O. Kravchuk<sup>1</sup>, V.I. Grygoruk<sup>1</sup>, V.I. Kanevskii<sup>2</sup><sup>1</sup>Taras Shevchenko National University of Kyiv  
Volodymyrska Str., 64/13, Kyiv, Ukraine, 01601<sup>2</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine  
General Naumov Str., 17, Kyiv, Ukraine, 03164e-mail: [vda7@ukr.net](mailto:vda7@ukr.net)

Received December 27, 2017

In this paper, we propose a model of a dipole with an atomic structure instead of the standard dipole model with point unlike charges and the Hertzian dipole model, which have significant drawbacks. The equations of the Hertzian dipole and the standard model operate from a distance much larger than size of the dipole, and the quasistatic Coulomb and Biot-Savart fields are the essence of the reactive near field, its own fields with a phase shift  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , which have no restrictions on the distances to a dipole, since they are directly related to charges and their motion – currents. In the framework of the proposed dipole model, we described the physical mechanisms for the formation of near and far fields of an oscillating dipole, which are based on the use of the Coulomb and Biot-Savart fields, the quasistatic lines of force of their electric charge fields  $\mathbf{E}$ , and the magnetic fields of the currents  $\mathbf{H}$  for the analysis of energy fluxes: reactive  $\mathbf{S}_r$  at  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$  and active  $\mathbf{S}_a$  at  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$  alike.

**KEY WORDS:** dipole, near field, far field, decompensation, oscillation

## МОДЕЛЬ ДИПОЛЯ ЗІ СТРУКТУРОЮ АТОМА

Д.О. Василенко<sup>1</sup>, В.С. Сидоренко<sup>1</sup>, П.О. Кравчук<sup>1</sup>, В.І. Григорук<sup>1</sup>, В.І. Канєвський<sup>2</sup><sup>1</sup>Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
вул. Володимирська, 64/13, Київ, Україна, 01601<sup>2</sup>Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України  
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, Україна, 03164

В роботі запропонована модель диполя зі структурою атома замість стандартної моделі диполя з точковими різнойменними зарядами та моделі диполя Герца, які мають істотні недоліки. Рівняння диполя Герца і стандартної моделі виконуються для відстані, що значно перевищує розмір самого диполя, а квазістатичні поля Кулона і Біо-Савара є суттю реактивного ближнього поля, його власними полями зі зсувом фаз  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , які не мають обмежень на відстань до диполя, оскільки безпосередньо зв'язані з зарядами та їхнім рухом – струмами. В рамках запропонованої моделі диполя нами були описані фізичні механізми формування ближніх і дальніх полів осцилюючого диполя, які ґрунтуються на використанні полів Кулона та Біо-Савара, квазістатичних силових ліній їх електричних зарядових полів  $\mathbf{E}$  і магнітних полів струмів  $\mathbf{H}$  для аналізу потоків енергії: як реактивних  $\mathbf{S}_r$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , так і активних  $\mathbf{S}_a$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ .

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** диполь, ближнє поле, дальнє поле, розкомпенсація, осциляція

## МОДЕЛЬ ДИПОЛЯ СО СТРУКТУРОЙ АТОМА

Д.А. Василенко<sup>1</sup>, В.С. Сидоренко<sup>1</sup>, П.А. Кравчук<sup>1</sup>, В.И. Григорук<sup>1</sup>, В.И. Каневский<sup>2</sup><sup>1</sup>Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко  
ул. Владимирская, 64/13, Киев, Украина, 01601<sup>2</sup>Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины  
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, Украина, 03164

В работе предложена модель диполя со структурой атома вместо стандартной модели диполя с точечными разноименными зарядами и модели диполя Герца, которые имеют существенные недостатки. Уравнения диполя Герца и стандартной модели работают от расстояния, намного превышающего размер самого диполя, а квазистатические поля Кулона и Био-Савара являются сутью реактивного ближнего поля, его собственными полями со сдвигом фаз  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , которые не имеют ограничений на расстояния к диполью, поскольку непосредственно связаны с зарядами и их движением – токами. В рамках предложенной модели диполя нами были описаны физические механизмы формирования ближних и дальних полей осциллирующего диполя, которые основаны на использовании полей Кулона и Био-Савара, квазистатических силовых линий их электрических зарядовых полей  $\mathbf{E}$  и магнитных полей токов  $\mathbf{H}$  для анализа потоков энергии: как реактивных  $\mathbf{S}_r$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , так и активных  $\mathbf{S}_a$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ .

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** диполь, ближнее поле, дальнее поле, раскомпенсация, осциляция

В классической электродинамике есть модель диполя Герца [1–4]. Это бесконечно малый бесструктурный элемент тока – фактически «чёрный ящик». В модели Герца нет реальных внутридипольных векторов  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  и  $\mathbf{S}$  [1], что не позволяет рассмотреть физические механизмы формирования реактивных и активных потоков энергии, соответственно ближнего и дальнего полей. В последнее время все больше и больше исследований: как теоретических [5, 6], так и экспериментальных [7, 8], показывают принципиальное отличие физических процессов, происходящих в ближнем и дальнем полях. В диполе Герца нет понятия межзарядовой силы  $\mathbf{F}$ , а следовательно и механизма установления равновесия амплитуды колебаний  $l_0$  дипольных зарядов под действием внешнего индуцирующего поля  $\mathbf{E}_0$ .

В стандартной модели диполем является система, состоящая из двух точечных зарядов  $+q$  и  $-q$ , расположенных на расстоянии  $l_0$  друг от друга, причём  $r \gg l_0$  (где  $r$  – расстояние от диполя к точке наблюдения) [9, 10]. Точечность зарядов этой стандартной модели должна допускать использование закона Кулона:  $F \sim (q_1 \cdot q_2) / l^2$ . Но попытка применения закона Кулона к зарядам атомного диполя приводит при  $l \rightarrow 0$  к сингулярности в нулевой точке (где заряды совмещаются и диполь схлопывается), так как при этом  $F \rightarrow \infty$ . И никакое внешнее поле (с конечной силой) не сможет развести заряды и поляризовать атом.

Известно, что при приложении внешнего поля атомы поляризуются и их дипольные моменты осциллируют с участием внутренних межзарядовых сил. Но это не силы закона Кулона – внутри атомного диполя закон Кулона не работает. Очевидно, что необходима новая модель диполя и другая формула для внутридипольной силы между зарядами осциллирующего диполя. Необходимо принципиально изменить сам подход к пониманию процессов, происходящих при осцилляции диполя.

Цель работы состоит в разработке новой модели диполя, более приближенной к реальности, нежели модель диполя Герца или стандартная модель с разнесенными точечными зарядами, а также описание преобразования реактивного ближнего поля в активное поле излучение с использованием предложенной модели.

### ПОЛОЖЕНИЯ МОДЕЛИ

В отличие от бесструктурной модели диполя Герца или стандартной модели с точечными зарядами мы предложили использовать для модели диполя реальную зарядовую структуру атома, в которой положительный заряд ядра всегда находится внутри электронной оболочки, и назвали её «моделью диполя со структурой атома». Эта модель функционирует для любых атомов и молекул, так как все они поляризуются во внешнем поле, образуя осциллирующие диполи. Предложенная атомная модель диполя на основе квазистатической электродинамики работает вне резонансов.

Собственные поля зарядов ядра и электронов атома порождаются процессами, которые имеют место быть внутри этих частиц. Данные процессы в статье не рассматриваются, поскольку выходят за рамки классической электродинамики. Их проявления видны только во внешних силовых полях зарядов.

Поскольку электронные орбитали центрально симметричны [11], то вместо пространственно распределенных по ним зарядов электронов мы ввели в предложенную модель диполя понятие «эквивалентного отрицательного заряда» ( $-q$ ), равного сумме зарядов всех электронов атома и расположенного в центре симметрии его электронных орбиталей. Это не реальный заряд, а его эквивалентная модель, облегчающая описание физических механизмов, происходящих при осцилляции реального диполя со структурой атома.

Центр положительного заряда  $+q$  (ядра) всегда находится внутри электронной оболочки (рис. 1), таким образом, поля зарядов  $+q$  и  $-q$  всегда перекрываются и частично компенсируют друг друга. Без внешнего поля ( $E_0 = 0$ ) центры зарядов  $+q$  и  $-q$  совмещены, компенсация зарядовых полей полная и атом неполяризован (рис. 1, а).

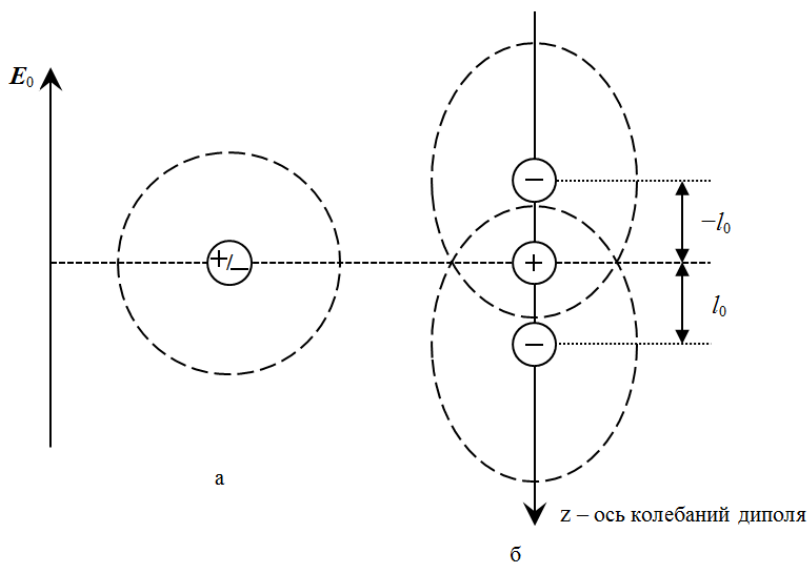


Рис. 1. Поляризация атома во внешнем электрическом поле (а – атом неполяризован, б – атом поляризован и осциллирует). Разнонаправленность осей  $E_0$  и  $z$  указывает на смещение электронной оболочки против внешнего поля, «+» – положительный заряд ядра атома, «-» – эквивалентный отрицательный заряд электронного облака. Пунктиром обозначено электронное облако

Во внешнем поле ( $E_0 \neq 0$ ) диполь осциллирует (рис. 1, б). В процессе осцилляции происходит

интерференция полей двух зарядов, одинаковых по величине, но противоположных по знаку. Ядро на порядки тяжелее электронов и поэтому практически неподвижно. Центры разноименных зарядов то отдаляются друг от друга (расходятся), то сближаются (сходятся). При этом они компенсируют то меньшую, то большую часть собственных квазистатических полей друг друга и их силовых линий. Сами поля остаются при своих зарядах, но интерференция полей разноименных зарядов уменьшает их внешнее силовое проявление, изменяя плотность силовых линий. Значительная часть силовых линий обоих зарядов находится в связанном состоянии взаимной компенсации и не проявляет себя в силовом взаимодействии. Это можно назвать интерференцией квазистатических полей. Таким образом, ближнее поле – это собственные квазистатические поля (силовые линии) Кулона и Био-Савара двух колеблющихся зарядов диполя, поля которых интерферируют при его осцилляции. Но внешне это выглядит как пульсация электромагнитного поля, реактивного по сдвигам фаз и знакопеременности потоков энергии.

Заметим, что электронная оболочка всегда содержит внутри себя не только эквивалентный отрицательный заряд, но и положительный заряд ядра, то есть фактически весь диполь. В данной модели осью диполя является прямая, проходящая через центр положительного заряда ядра и центр эквивалентного отрицательного заряда электронного облака атома.

При приложении внешнего поля электронная оболочка смещается (вытягивается) относительно ядра против поля и центры зарядов  $+q$  и  $-q$  расходятся (рис. 2, а). Атом поляризуется за счёт частичной раскомпенсации перекрывающихся полей расходящихся разноименных зарядов.

При изменении знака внешнего поля, направление смещения электронной оболочки изменяется на противоположное (рис. 2, б; 1, б). Силовые линии электрического поля диполя, согласно электростатике, начинаются на положительном заряде и заканчиваются на отрицательном. Они всегда противоположны внешнему полю  $E_0$  и поэтому частично компенсируют его, чем и объясняется уменьшение амплитуды волны в диэлектрике в  $\epsilon$  раз (где  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость).

В процессе смещения эквивалентного отрицательного заряда электронной оболочки возникает ток, который по закону Био-Савара генерирует вокруг линии тока (оси диполя  $l$ ) замкнутые силовые линии тороидального квазистатического магнитного поля. Направление тока противоположно смещению электронной оболочки, то есть совпадает с направлением внешнего поля.

Важным элементом предложенной атомной модели является то, что в процессе поляризации, то есть при изменении плеча диполя  $l$ , меняется величина раскомпенсации полей (этого нет в стандартной модели и модели диполя Герца). В стандартной модели диполя раскомпенсация полей постоянная, что не соответствует действительности. А диполь Герца – бесструктурный, что не позволяет рассмотреть явление раскомпенсации в принципе.

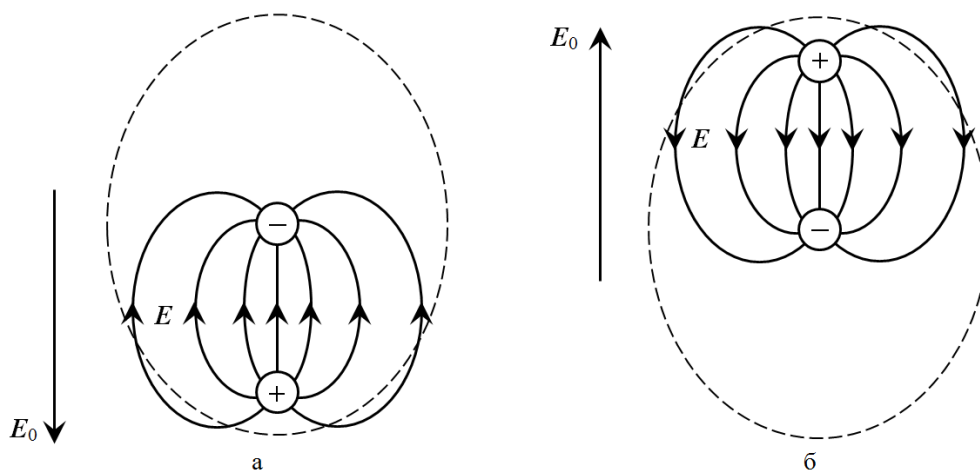


Рис. 2. Атомный диполь во внешнем электрическом поле при разных направлениях вектора напряженности (а и б).  
 «+» – положительный заряд ядра атома, «-» – эквивалентный отрицательный заряд электронного облака.  
 Пунктиром обозначено электронное облако.

С увеличением внешнего поля центр электронной оболочки всё дальше смещается от положительного ядра, что приводит к еще большей раскомпенсации перекрывающихся полей зарядов  $+q$  и  $-q$ . Таким образом, при изменении внешнего поля дипольный момент  $p = ql$  меняется за счёт эффекта раскомпенсации.

Очевидно, что для описания сил притяжения между противоположными по знаку зарядами в процессе частичной раскомпенсации их полей под действием внешнего поляризирующего поля вместо формулы закона Кулона необходима другая формула, которая учитывает изменение величины раскомпенсации полей зарядов с изменением плеча диполя  $l$  (рис. 3).

Для исследуемой модели диполя нами предложена функциональная формула дипольной силы, возникающей между разноименными зарядами в процессе раскомпенсации их полей:

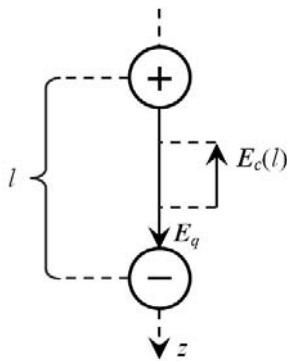


Рис. 3. Направление векторов  $E_q$  и  $E_c$  при раскомпенсации / компенсации полей зарядов диполя.

$$F(l) \sim E_q - E_c(l),$$

где  $E_q$  – напряжённость электрического поля заряда,  $E_c(l)$  – напряжённость скомпенсированной части электрического поля заряда (компенсация), причём  $l \uparrow \Rightarrow E_c \downarrow \Rightarrow F \uparrow$  ( $l \downarrow \Rightarrow E_c \uparrow \Rightarrow F \downarrow$ ). Также формулу для дипольной силы можно представить в следующем виде:

$$F(l) \sim E_{dc}(l), \tag{1}$$

где  $E_{dc}(l) = E_q - E_c(l)$  – напряжённость нескомпенсированной части электрического поля заряда (раскомпенсация). Тут  $l \uparrow \Rightarrow E_{dc} \uparrow \Rightarrow F \uparrow$  ( $l \downarrow \Rightarrow E_{dc} \downarrow \Rightarrow F \downarrow$ ). В этой формуле отсутствует проблема сингулярности в нулевой точке, так как:

$$l \rightarrow 0 \Rightarrow E_{dc} \rightarrow 0 \Rightarrow F \rightarrow 0. \\ (E_c \rightarrow E_q)$$

Если внешнее поле  $E_0$  разводит заряды то, согласно формуле дипольной силы, они наоборот – притягиваются друг к другу. Так силовое действие внешнего поля  $E_0$  и дипольной силы  $F$  прямо противоположны и дальнейший рост амплитуды  $l_0$  колебаний диполя останавливается при достижении равновесия этих сил.

На рис. 4 изображены графики зависимости силы взаимодействия между разноименными зарядами от расстояния между ними. Осцилляция атома всегда происходит в начале первой зоны (жирный участок линии) до его ионизации. Ядро остаётся внутри электронной оболочки и раскомпенсация полей разноименных зарядов во внешнем поле частичная. При больших внешних полях начинает проявляться нелинейность (тонкий участок линии), а при дальнейшем их росте – ионизация атома (вторая зона), то есть отрыв электронной оболочки от ядра. В третьей зоне электронная оболочка и ядро уже отделены в пространстве друг от друга. И тут работает закон Кулона.

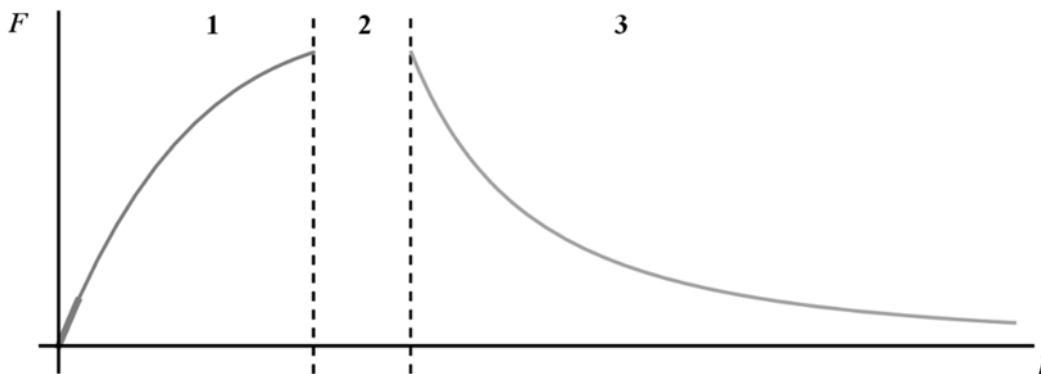


Рис. 4. Качественное изображение зависимости силы взаимодействия между зарядами  $+q$  и  $-q$  от расстояния между ними. (1 – зона осцилляции, в которой работает формула дипольной силы (1), 2 – зона ионизации с отрывом электронной оболочки от ядра, 3 – зона действия закона Кулона между разделёнными зарядами, образованными в результате ионизации атома).

В нашей структурной атомной модели появляются внутридипольные квазистатические векторы  $E$ ,  $H$  и  $S$ , что дает возможность рассмотреть в процессе осцилляции механизмы формирования потоков энергии: как реактивных  $S_r = E \times H$  (где  $E$  и  $H$  – компоненты электрической и магнитной напряженностей ближнего поля, которые имеют сдвиг фаз  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ ), так и активных  $S_a = E \times H$  (где  $E$  и  $H$  – компоненты электрической и магнитной напряженностей активного поля излучения со сдвигом фаз  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ ). Вместе с тем, как уже стало известно,  $E \equiv E_{dc}$  и соответственно  $H \equiv H_{dc}$  (где  $H_{dc}$  – напряжённость нескомпенсированной части магнитного поля движущегося заряда).

Итак, ближнее поле – это поле раскомпенсации. Оно появляется и усиливается, когда разноименные заряды во внешнем индуцирующем поле расходятся. И исчезает, когда они проходят через нулевую точку, то есть совмещаются и полностью компенсируют при интерференции силовое влияние полей друг друга (сами собственные поля всегда неотделимы от своих зарядов). При расхождении зарядов полная компенсация нарушается и начинает увеличиваться нескомпенсированное ближнее поле. При схождении, наоборот,

интерферирующие поля разноименных зарядов совмещаются вплоть до полной компенсации внешних полей при их совмещении в нулевой точке. Таким образом, поля обоих зарядов являются «интерференционной маской» друг для друга, связывая изменяющуюся в процессе осцилляции часть силовых линий.

### ДИНАМИКА ПРОЦЕССОВ ОСЦИЛЛЯЦИИ В ДИПОЛЕ

Рассмотрим процессы, протекающие при осцилляции диполя в 4-х фазах (четвертях периода). Соответствие между значениями  $i, H$ , а также  $E_{dc}, F$ , как функций расстояния  $l$  между разноименными зарядами диполя, и направлениями реактивного  $S_r$  и активного  $S_a$  потоков энергии в 4-х фазах периода осцилляции показано на рис. 5.

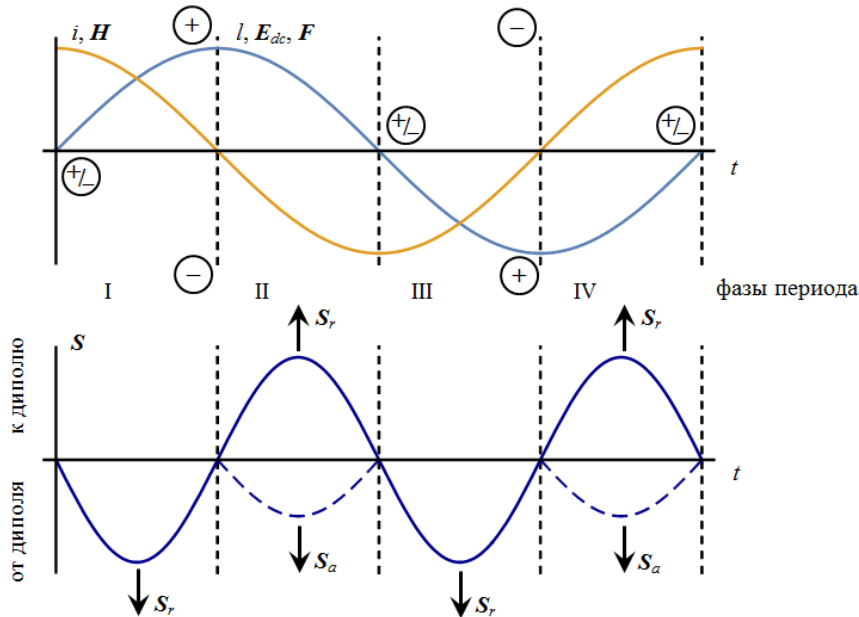


Рис. 5. Соответствие между значениями  $i, H$ , а также  $E_{dc}, F$ , как функций плеча диполя  $l$ , и направлениями реактивного  $S_r$  и активного  $S_a$  потоков энергии в 4-х фазах периода осцилляции.

В начале фазы I (рис. 6) модуль напряженности внешнего поля  $E_0$  из нулевого значения начинает увеличиваться, а ее вектор направлен вверх. Из-за чего заряды из нулевой точки расходятся, и возникает ближнее поле. На этапе увеличения раскомпенсации возрастает плотность силовых линий. Квазистатическое ближнее поле распространяется со скоростью света, но концы силовых линий, плотность которых растёт пропорционально растущей напряжённости поля, замкнуты на заряды.

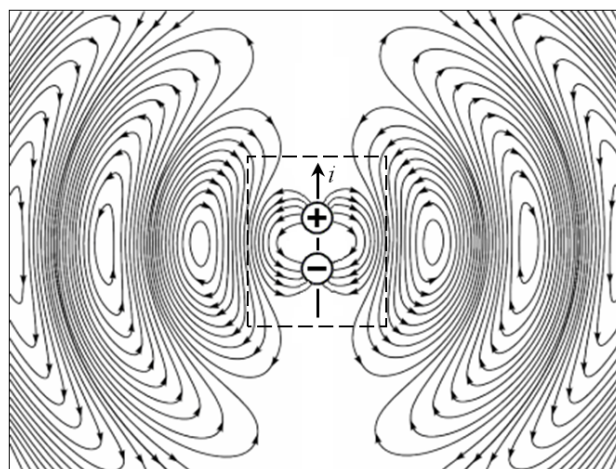


Рис. 6. Начало фазы I (рассматриваемая область обведена пунктирной линией). Заряды из нулевой точки начали расходиться:  $-q$  движется вниз, а ток направлен вверх.

Поток энергии  $S_r$  направлен от диполя вправо ортогонально его оси (рис. 7). Таким образом, при расхождении зарядов идёт накачка квазистатической энергии реактивного ближнего поля, силовые линии которого замкнуты на заряды.

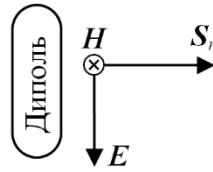


Рис. 7. Направление векторов  $E$ ,  $H$  и  $S_r$  в начале фазы I.

Когда заряды на мгновение останавливаются на максимуме  $l$  (когда  $l = l_0$ ), то  $E$  становится максимальной, а ток и  $H$  равны нулю (рис. 8). При прохождении нулевой точки ситуация обратная:  $E$  равна нулю, а ток и  $H$  – максимальны. Таким образом получается сдвиг фаз  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$  и квазистатическое ближнее поле имеет чисто реактивный характер.

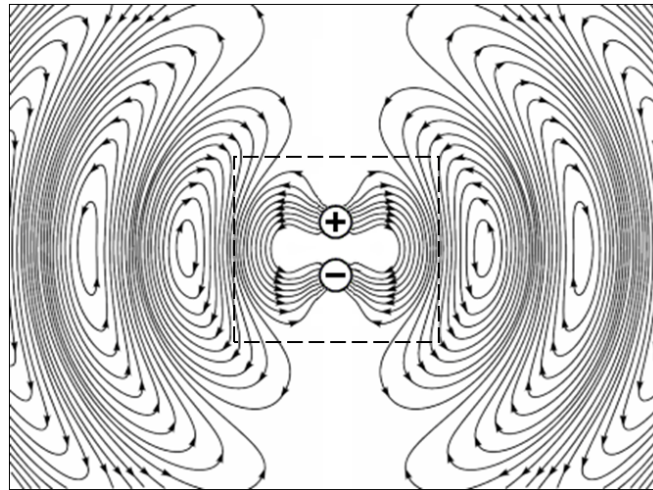


Рис. 8. Конец фазы I (рассматриваемая область обведена пунктирной линией).

Заряды разошлись на максимум  $l_0$ , ток отсутствует. Наканун максимум плотности силовых линий (энергии) ближнего поля. Все силовые линии все еще замкнуты на зарядах, а таким образом поля излучения пока нет

В начале фазы II (рис. 9) заряды сходятся:  $-q$  движется вверх, а ток направлен вниз. И поскольку взаимная компенсация увеличивается ( $E_c \uparrow$ ), то силовое поле уменьшается ( $E_{dc} \downarrow$ ) и таким образом часть силовых линий накачанного в фазе I ближнего поля оказываются избыточными. Они отрываются от разноименных зарядов, превращаясь в самозамкнутые петли поля излучения. Таким образом, процесс самозамыкания и преобразования ближнего поля в поле излучения идёт не в одной нулевой точке, где  $E_{dc} = 0$ , а в течение всей фазы схождения зарядов за счёт процесса компенсации при уменьшении плеча диполя  $l$ . Идёт сброс избыточных силовых линий, которые самозакольцовываются и превращаются в замкнутые петли поля излучения.

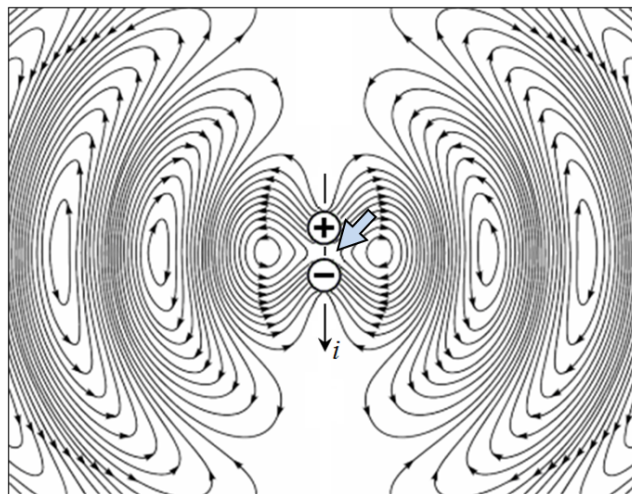


Рис. 9. Начало фазы II.

Заряды сходятся, и уменьшается  $E_{dc}$  в процессе компенсации. Область самозакольцовывания обозначена наклонной стрелкой.



В фазе II одновременно существуют два поля: уменьшающееся квазистатическое реактивное ближнее поле, которое замкнуто на заряды, и увеличивающееся активное свободное поле излучения (дальнее поле), оторвавшееся от зарядов и образовавшееся самозамкнутые петли.

Рассмотрим направления потоков энергии этих двух полей. Реактивное ближнее поле фазы II показано на рис. 10. Вектор  $E$  и ток направлены вниз, поэтому вектор  $H$  направлен «к нам». Таким образом, вектор Пойнтинга реактивной энергии  $S_r$  направлен к диполью (ортогонально его оси).

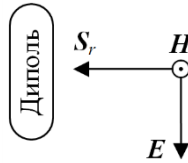


Рис. 10. Направление векторов  $E$ ,  $H$  и  $S_r$  в экваториальной плоскости диполью в фазе II.

Рассмотрим формирование активного поля излучения в фазе II. Поскольку при схождении зарядов их силовое поле уменьшается за счёт эффекта компенсации, то должна уменьшаться и плотность силовых линий замкнутых на заряды. Вектор  $E$  диполью направлен вниз и вблизи нулевой точки почти равен нулю при почти максимальном значении  $H$  (рис. 10). Квазистатическое ближнее поле, замкнутое на заряды, имеет чисто реактивный характер. После отрыва от зарядов и самозакольцовывания в петлю,  $E$  инвертируется (меняет направление на противоположное) и становится большим по величине. Это означает, что исчезает реактивный сдвиг по фазе  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$  и данное реактивное поле превращается в активное поле излучения  $S_a$  ( $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ ) (рис. 11).

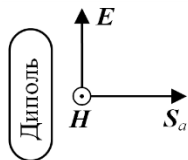


Рис. 11. Направление векторов  $E$ ,  $H$  и  $S_a$  в экваториальной плоскости диполью в фазе II.

Вектор  $S_a$  поля излучения направлен от диполью (ортогонально его оси) вдаль и растёт по величине по мере сокращения силовых линий ближнего поля, замкнутого на заряды. Примечательно, что в одно и то же время, в одном и том же месте существует два потока энергии: реактивный и активный. Причём они направлены в противоположные стороны. И реактивный уменьшается, а активный растёт так, что часть большой реактивной энергии трансформируется в малую активную (рис. 5, 12). При схождении диполью работает как преобразователь накопленной в предыдущей фазе энергии ближнего поля в виде пучка силовых линий связанных с зарядами в замкнутые петли поля излучения. Таким образом, преобразователем полей является диполью.

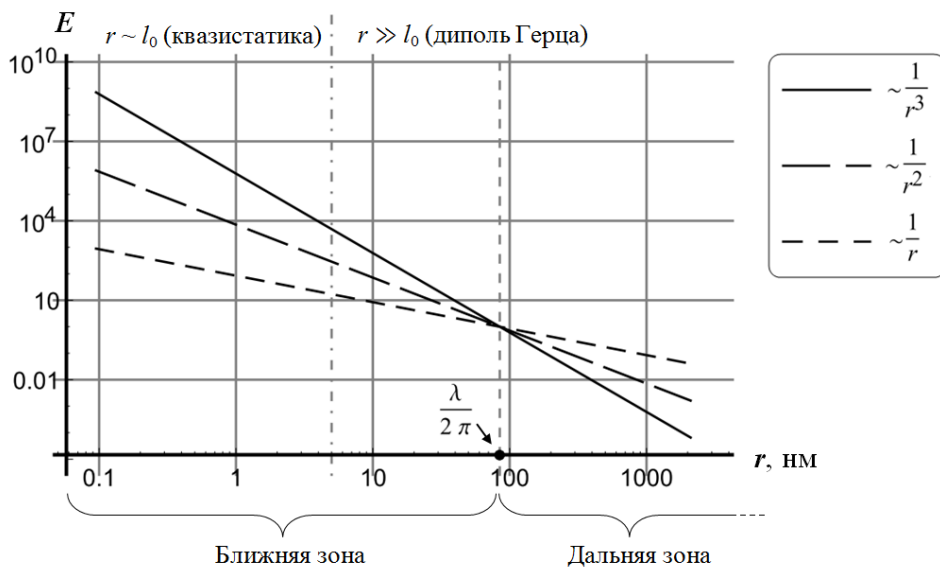


Рис. 12. Графики зависимости относительных значений напряженности электрического поля от расстояния от диполью для 3-х компонент электрического поля ( $\lambda = 532$  нм).

Поле излучения рождается непосредственно в точке самозакольцовывания, так как направление вектора  $\mathbf{E}$ , а таким образом и потока энергии  $\mathbf{S}$ , меняется на противоположное в момент отрыва избыточной силовой линии от зарядов и её самозакольцовывания в замкнутую петлю поля излучения (рис. 11).

Рассмотрим соотношение этих потоков энергии ( $\mathbf{S}_r$  и  $\mathbf{S}_a$ ). Все осцилляторы являются своего рода колебательным контуром с реактивными и активными потоками энергии, причём реактивные гораздо больше активных – в  $Q$  раз (где  $Q$  – добротность контура). При включении внешнего поля амплитуда реактивных колебаний начинает расти и этот рост ограничивается только наличием активных потерь, выводящих энергию из осциллятора. В колебательном контуре это активное сопротивление потерь, а в диполе – это активные потери на излучение энергии  $\mathbf{S}_a$ . Как видно из рис. 12, в локальной зоне диполя (при  $r \sim l_0$ ) амплитуды реактивных полей на порядки превышают амплитуды активных полей излучения. Аналогичная ситуация и в радиотехнике: на резонансе реактивные поля (напряженность  $\mathbf{E}$  на конденсаторе и ток, а таким образом и  $\mathbf{H}$  катушки индуктивности) возрастают в  $Q$  раз. Аналогично и в диполе  $\mathbf{S}_r \gg \mathbf{S}_a$ . Это означает, что в фазе схождения, когда одновременно существуют два поля с противоположными направлениями потоков энергии, активный поток поля излучения  $\mathbf{S}_a$  незначителен по сравнению с реактивным  $\mathbf{S}_r$ . Поэтому плотность оторвавшихся и самозамкнувшихся петель поля излучения много меньше плотности замкнутых на заряды силовых линий ближнего поля.

В конце фазы II (рис. 13) силовые линии ближнего поля, оторвавшись от своих зарядов, самозамкнулись в петли поля излучения. Абсолютные значения тока и  $\mathbf{H}$  в нулевой точке максимальны, но  $\mathbf{E}_{dc} = 0$  и реактивного потока  $\mathbf{S}_r$  нет. Справа от диполя (рис. 11) вектор  $\mathbf{H}$  направлен «к нам», вектор  $\mathbf{E}$  поля излучения направлен вверх, следовательно, максимальный активный поток  $\mathbf{S}_a$  направлен от диполя (ортогонально его оси). Силовые линии накачанного в предыдущей фазе ближнего поля преобразованы диполем в петли свободного поля излучения (рис. 11, 13). А реактивный поток  $\mathbf{S}_r$  равен нулю, поскольку электрическое поле зарядов в нулевой точке полностью скомпенсировано.

Далее всё повторяется во втором полупериоде, только с инверсией знаков зарядов и токов – формируются силовые линии следующего уже инверсного полупериода поля излучения. И самозакольцованные петли активного поля распространяются от диполя (ортогонально его оси) влево.

Итак, отрыв силовых линий с их самозамыканием в петли поля излучения идёт только в фазах II и IV схождения зарядов и уменьшения величины раскомпенсации (рис. 5). Происходит преобразование ближнего квазистатического поля, накачанного в фазах I и III расхождения, в свободное поле излучения, распространяющееся из ближней зоны в дальнюю.

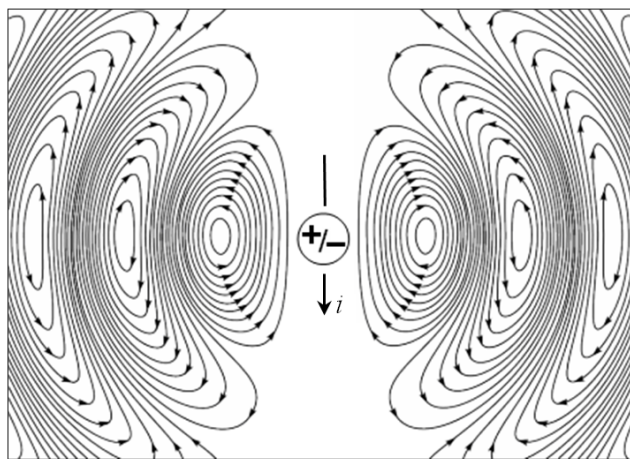


Рис. 13. Конец фазы II.

Заряды находятся в нулевой точке и их поля, а таким образом и силовые линии реактивного  $\mathbf{S}_r$  ближнего поля, полностью скомпенсировались интерференцией. Осталось только небольшое количество оторвавшихся и самозакольцовавшихся петель распространяющегося в дальнюю зону активного  $\mathbf{S}_a$  поля излучения.

**В фазах расхождения (I и III)** за счёт раскомпенсации полей увеличивается плотность силовых линий реактивного ближнего поля, замкнутых на заряды. Нарастает энергия ближнего поля, но не происходит процесс преобразования его в замкнутые петли свободного поля излучения. Реактивный вектор Пойнтинга  $\mathbf{S}_r$  в нарастающем ближнем поле направлен от диполя (ортогонально его оси).

**В фазах схождения (II и IV)** за счёт компенсации полей уменьшается плотность силовых линий реактивного ближнего поля, замкнутых на заряды. Реактивный вектор Пойнтинга  $\mathbf{S}_r$  направлен к диполю (ортогонально его оси). Сокращающиеся силовые линии самозакольцовываются и образуют замкнутые петли поля излучения. В самозамкнутых петлях направление вектора  $\mathbf{E}$ , а следовательно и потока энергии в момент отрыва избыточных силовых линии от зарядов, меняется на противоположное (с  $\mathbf{S}_r$  на  $\mathbf{S}_a$ ) (рис. 5, 10-11). В этот

момент изменяется и сдвиг фаз с реактивного  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$  на активный  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ , поскольку поле  $\mathbf{E}$  из стремящегося к нулю  $E_{dc}$  становится большим и синфазным с большим  $\mathbf{H}$  в нулевой точке.

Таким образом, на этапе схождения имеем одновременно два типа полей: реактивное и активное, потоки энергии которых  $S_r$  и  $S_a$  направлены в противоположные стороны (рис. 5). Это сокращающееся ближнее поле, замкнутое на заряды, и свободное от зарядов растущее поле излучения в виде самозамкнувшихся петель. Соотношение этих полей непрерывно меняется вплоть до нулевой точки, в которой  $E_{dc} = 0$ . Но остаются замкнутые петли свободного поля излучения, распространяющиеся в дальнюю зону (рис. 13).

Итого имеем следующую ситуацию. В фазе I поток энергии  $S_r$  направлен от диполя и накачивает энергию ближнего поля. В фазе II  $S_r$  направлен к диполю. В фазе III поток энергии, но уже инвертированный, снова направлен от диполя и накачивает энергию ближнего поля противоположной полярности. В фазе IV поток реактивной энергии снова направлен к диполю. Таким образом, поток реактивной энергии ближнего поля 4 раза за период меняет направление своего движения. И поэтому в среднем за период реактивный поток ближнего поля равен нулю.

В литературе соотношение амплитуд реактивных и активных полей обычно приводятся на графиках в линейном или полулогарифмическом масштабе [1]. Но соотношение амплитуд в ближней зоне сложно сосчитать по крутым гиперболическим кривым. Поэтому данные графики удобнее отображать в логарифмическом масштабе (рис. 12). На графики квазистатических полей ограничение диполя Герца  $r \gg l_0$  не распространяется, так как силовые линии начинаются непосредственно от своих источников – зарядов и их движения (токов). Поля в локальной зоне на расстоянии  $r \sim l_0$  ( $\sim 1\text{Å}$ ) становятся более сложными. К ним добавляются мультиполя разных порядков и их расчёт резко усложняется. И поэтому имеет смысл проведенный на уровне классической электродинамики качественный анализ физических механизмов формирования потоков энергии ближних и дальних полей осциллирующего диполя, основанный на использовании квазистатических силовых линий их электрических зарядовых полей  $\mathbf{E}$  (полей Кулона) и магнитных полей  $\mathbf{H}$  токов (полей Био-Савара) для анализа потоков энергии: как реактивных  $S_r$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , так и активных  $S_a$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ .

### МЕХАНИЗМ ДВИЖЕНИЯ ВОЛНЫ ПОЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Приведем два уравнения Максвелла (закон Ампера-Максвелла и закон индукции Фарадея) для вакуума (в системе СИ):

$$\text{rot } \mathbf{H} = \mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (3)$$

Чтобы выяснить механизм распространения электромагнитной волны, выберем начальную точку при максимальных значениях  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  (рис. 14). Это определяет поведение вектора  $\mathbf{E}$  в следующий момент времени – его модуль может только уменьшаться.

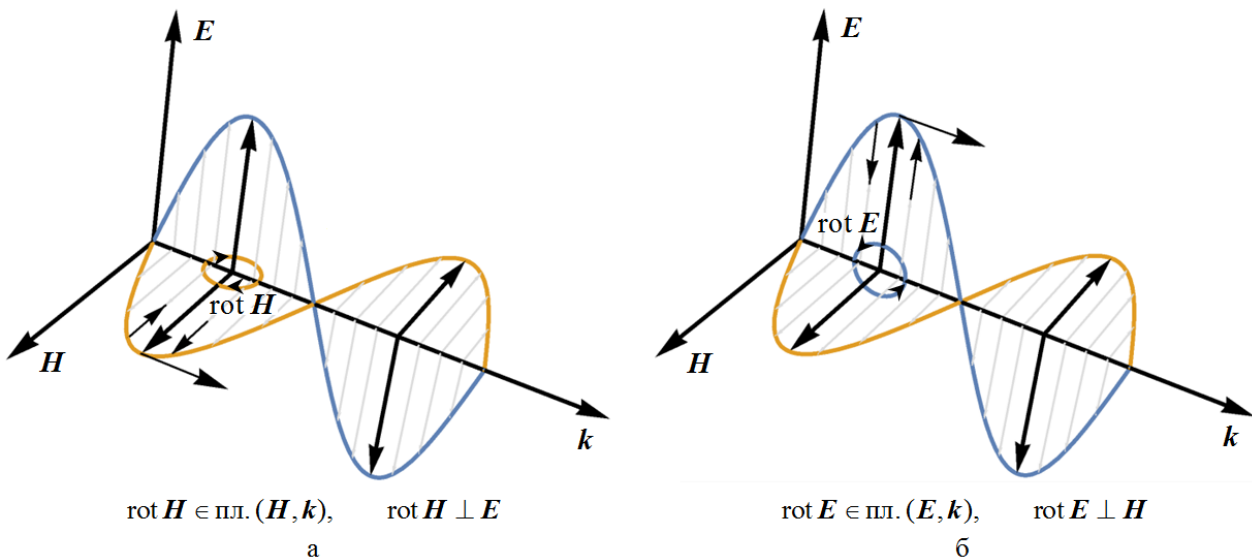


Рис. 14. Векторное представление активной электромагнитной волны поля излучения с изображением вихря  $\mathbf{H}$  (а) и вихря  $\mathbf{E}$  (б). Амплитуды  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  синфазны ( $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ ).

Уменьшение  $E$ , согласно уравнению (2), вызовет  $\text{rot } H$ . Вихрь магнитного поля в этой точке лежит в плоскости  $(H, k)$  (рис. 14, а). Магнитное поле вихря суммируется со значением  $H$  переднего фронта и вычитается из заднего фронта. Следовательно, максимум  $H$  смещается вперёд (в направлении  $k$ ), а, таким образом, в исходной точке  $H$  уменьшается.

В соответствии с уравнением (3), уменьшение  $H$  в исходной точке вызовет в ортогональной плоскости  $(E, k)$  вихрь  $E$  (рис. 14, б), значение которого будет суммироваться с передним фронтом  $E$  и вычитаться из заднего. Максимум  $E$  сместится вперёд (в направлении  $k$ ), а в исходной точке  $E$  уменьшится. Это опять вызовет такой вихрь  $H$ , который снова переместит максимум  $H$  вперёд, и так далее.

Таким образом, вся волна путём взаимного перелива своих гребней будет распространяться вперёд (в направлении  $k$ ).

Волна не есть распространяющиеся колебания, как ошибочно иногда говорят [10]. Любое электромагнитное поле можно разложить на активные и реактивные составляющие. В колебаниях  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$  и поэтому когда амплитуда одного из полей максимальна, амплитуда второго равна нулю и наоборот. А в волнах  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$  – амплитуды синфазны. Значит, энергии реактивных полей полностью перекачиваются друг в друга во всей области колебаний. Этого не происходит в волнах, в которых амплитуды  $E$  и  $H$  никогда не обнуляются – они просто переливают гребни друг друга в направлении распространения ( $k$ ).

### ВЫВОДЫ

Показано, что попытка применения закона Кулона к атомному диполю должна привести к сингулярности в нулевой точке и невозможности поляризации атома в дальнейшем. Предложена модель диполя со структурой атома, которая более приближена к реальности, чем модель диполя Герца или стандартная модель с точечными зарядами.

Классическая модель диполя с точечными зарядами к атомному диполю неприменима, поскольку положительный заряд ядра всегда находится внутри распределенного отрицательного заряда электронной оболочки и всегда имеет место то или иное значение компенсации полей этих зарядов.

Главный недостаток стандартной модели диполя с точечными зарядами состоит в постоянном значении суперпозиции силовых линий полей зарядов диполя в процессе его осцилляции, что принципиально не позволяет объяснить физический механизм преобразования ближнего поля в поле излучения.

Показано, что при осцилляции электронной оболочки под действием внешнего поля происходит частичная раскомпенсация полей зарядов, которая зависит от плеча диполя  $l$  и определяет силу притяжения разноимённых зарядов.

Предложена функциональная формула дипольной силы, возникающей между разноимёнными зарядами в процессе осцилляции диполя и раскомпенсации их полей:  $F(l) \sim E_{dc}(l)$ .

Введено понятие локальной зоны диполя. Это зона  $r \sim l_0$ , в которой диполь уже не бесконечно малый элемент тока, как в диполе Герца, а структурный элемент, в котором различаются разноимённые заряды, генерирующие электрические  $E$  и магнитные  $H$  поля, а также реактивные  $S_r$  и активные  $S_a$  потоки энергии. Поля в локальной зоне на расстоянии  $r \sim l_0$  ( $\sim 1\text{Å}$ ) становятся более сложными. К ним добавляются мультиполя разных порядков, их расчёт резко усложняется и поэтому имеет смысл проведенный на уровне классической электродинамики качественный анализ физических механизмов формирования потоков энергии ближних и дальних полей осциллирующего диполя, основанный на использовании квазистатических силовых линий их электрических зарядовых полей  $E$  (полей Кулона) и магнитных полей  $H$  движущихся зарядов (полей Био-Савара) для анализа потоков энергии: как реактивных  $S_r$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ , так и активных  $S_a$  при  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ .

Применение в анализе квазистатических силовых линий, начинающихся непосредственно от их источников – зарядов и токов, позволило в предложенной модели диполя снять ограничения диполя Герца  $r \gg l_0$  и дать физический анализ механизмов формирования реактивных ближних полей и трансформации их в активные поля излучения, а также описать потоки энергии в локальной зоне осциллятора  $r \sim l_0$ .

Показано, что в фазах схождения в момент отрыва силовых линий ближнего поля от зарядов и их самокольцевывания в петли свободного поля излучения направление вектора  $E$ , а таким образом и потока энергии, меняется на противоположное (с  $S_r$  на  $S_a$ ). Так в момент отрыва избыточных силовых линий от зарядов поле излучения рождается непосредственно в точке самокольцевывания в замкнутую петлю силовых линий.

Отрыв силовых линий с их замыканием идёт только на этапах схождения зарядов и уменьшения величины раскомпенсации. Идёт преобразование ранее накачанной энергии ближнего квазистатического поля в энергию свободного поля излучения, распространяющегося из ближней зоны в дальнюю.

Описан механизм движения волны поля излучения путём перелива гребня в соответствии с уравнениями Максвелла. Показано принципиальное отличие волны (активного поля с  $\Delta\varphi_{E,H} = 0$ ) от колебания (реактивного поля с  $\Delta\varphi_{E,H} = \pi/2$ ).

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы выражают благодарность Государственному фонду фундаментальных исследований Украины (грант Ф76/33332).

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Sydorenko V.S., Gayday Y.O., Zhyla S.V., Sinkevych O.V. Distribution of the Poynting vector in the near field of the Hertz dipole // *Bullet. Univ. Kiev. Ser.: Radiophys. and Electron.* – 2003. – Iss. 1. – P. 55–59. (in Ukrainian)
2. Sydorenko V.S., Gayday Y.O., Zhyla S.V. Peculiarity of near-field of Hertz dipole // *Bullet. Univ. Kiev. Ser.: Phys. & Math.* – 2005. – Iss. 2. – P. 365–372. (in Ukrainian)
3. McDonald K.T. Radiation in the Near Zone of a Hertzian Dipole [Electronic resource] // Joseph Henry Laboratories, Princeton University. – 2004. – URL: <http://www.physics.princeton.edu/~mcdonald/examples/nearzone.pdf>
4. McDonald K.T. Flow of Energy and Momentum in the Near Zone of a Hertzian Dipole [Electronic resource] // Joseph Henry Laboratories, Princeton University. – 2014. – URL: [http://www.physics.princeton.edu/~mcdonald/examples/hertzian\\_momentum.pdf](http://www.physics.princeton.edu/~mcdonald/examples/hertzian_momentum.pdf)
5. Staliunas K., Markoš P., Kuzmiak V. Scattering properties of a PT dipole // *Phys. Rev. A.* – 2017. – Vol. 96. – Iss. 4. – P. 043852.
6. Wong H.M.K., Dezfouli M.K., Axelrod S., Hughes S., Helmy A.S. Theory of hyperbolic stratified nanostructures for surface enhanced Raman scattering // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 96. – P. 205112.
7. Cao D., Cazé A., Calabrese M., Pierrat R., Bardou N., Collin S., Carminati R., Krachmalnicoff V., De Wilde Y. Mapping the radiative and the apparent non-radiative local density of states in the near field of a metallic nanoantenna // *ACS Photonics.* – 2015. – Vol. 2. – Iss. 2. – P. 189–193.
8. Boutelle R.C., Yi X., Neuhauser D., Weiss S. SOFI for Plasmonics: Extracting Near-field Intensity in the Far-Field at High Density // *ACS Nano.* – 2016. – Vol. 10. – Iss. 8. – P. 7955–7962.
9. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Course of Theoretical Physics. Vol. 2: The Classical Theory of Fields (8th ed.)*. – Moscow: Fizmatlit, 2012. – 536 p. (in Russian)
10. Kuznetsov S.I. *Oscillations and waves. Geometric and wave optics (2nd ed.)*. – Tomsk: TPU, 2007. – 170 p. (in Russian)
11. Stas D.V., Plyusnin V.F. *Quantum Mechanics of Molecules. Part 1: Atom.* – Novosibirsk: NSU, 2008. – 186 p. (in Russian)

Алла Таньшина<sup>i</sup>*К 100-летию НАН Украины  
& 90-летию юбилею УФТИ – ННЦ «ХФТИ»*

В канун 90-летия Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт» (далее – ННЦ «ХФТИ») представляется уместным вспомнить как его предысторию, так и воздать дань уважения легендарным фундаментам Украинского физико-технического института (далее – УФТИ), которые ещё в 30-х годах прошлого столетия заложили краеугольный камень в основание мировой славы УФТИ – ННЦ «ХФТИ».

*Светлой памяти академика И. В. Обреимова,  
директора-организатора УФТИ*

**СТОИТ НАПОМНИТЬ:  
«ЭТОГО НИГДЕ В СССР НЕ БЫЛО». –  
УКРАИНА, ХАРЬКОВ, УФТИ**

*Истоки.**Аннеси (Франция) – Санкт-Петербург**Мне пришлось ... зарабатывать  
не только на себя, но и на семью.  
Из автобиографии И. В. Обреимова*

Иван Васильевич Обреимов родился 8 марта 1894 года во Франции, в городе Аннеси. По семейным преданиям, его отец – Василий Иванович Обреимов – был высокообразованным человеком с отчаянно мятежной душой. Так, окончив с отличием математический факультет Казанского университета, он отклонил лестное предложение профессора Бальцани остаться работать на его кафедре по той лишь причине, что однажды профессор имел неосторожность в разговоре с ним перейти на повышенный тон. Поэтому последующие годы Василий Иванович Обреимов был вынужден посвятить преподаванию математики в частной гимназии.

1871 год стал роковым в его жизни: Василий Иванович был арестован и отправлен в ссылку за политическую неблагонадежность. Однако вскоре организовал удачный побег и некоторое время жил нелегально, устроившись домашним учителем.

В начале 90-х годов Обреимову удалось эмигрировать за границу. Во Франции появились на свет два его сына от второго брака – Иван (1894 г.) и Александр (1896 г.). В 1896 году молодая чета Обреимовых принимает решение возвратиться в Россию. Отчасти это стало возможным потому, что многолетние хлопоты о помиловании увенчались успехом. Местом постоянного жительства был выбран Санкт-Петербург.

Василию Ивановичу посчастливилось и найти неплохое место преподавателя математики в восьмиклассном Коммерческом училище. Туда же он записал учениками и своих сыновей.

На протяжении последующих лет Василий Иванович Обреимов пытается совмещать педагогическую работу, дающую средства к существованию, с волонтерской научно-просветительской деятельностью. Как свидетельствуют немногочисленные архивные данные, он был одним из активнейших составителей Энциклопедического словаря, а также автором двух научно-популярных книг по математике.

В 1909 году семью неожиданно настигло горе – Василий Иванович скоропостижно скончался. Осиротевшая семья, оставшись без кормильца, вынуждена была оставить столицу и переехать в Гатчину. Ивану и Александру пришлось очень рано повзрослеть. К примеру, еще будучи подростком, Иван (как старший из сыновей) стал всерьез помогать матери пополнять скудный семейный бюджет. Некоторое время он подрабатывал в качестве гувернера и учителя игры на рояле.

В 1910 году трудолюбивый юноша блестяще заканчивает (с золотой медалью!) Гатчинский сиротский институт и поступает в Санкт-Петербургский университет на физико-математический факультет, в группу физики.

Современный читатель может прочувствовать студенческую атмосферу тех лет, ознакомившись с небезынтересной цитатой из его эпистолярного наследия: «В мое время в Петербургском университете обучалось 12000 студентов. Среди них большую часть составляли юристы. На математическое отделение (в группы математики, астрономии, физики) поступало ежегодно около 300 человек. Сдавало государственные экзамены около 60 человек. Таким образом, курс оканчивало лишь 20% поступавших».

<sup>i</sup> Статья написана по материалам докторской диссертации (научный куратор – академик НАН Украины Виктор Григорьевич Барьяхтар).

Весьма интересную, но немногочисленную категорию составляли великовозрастные студенты. Например, народные учителя, вышедшие на пенсию, бывшие студенты других факультетов. Они поступали в университет из любви к науке. На нас, молодых студентов, они оказывали сильное влияние. От них мы узнавали о марксизме, они помогали нам лучше понять классовую борьбу в России».

Так или иначе, но самостоятельная студенческая жизнь, несмотря на тяжелейшее материальное положение, благоприятно сказалась на формировании личности Вани Обреимова: университетские годы закалили его характер и развили уверенность в своих силах. Не исключено, что именно поэтому он специально заметит в автобиографии: «Во время прохождения университетского курса зарабатывал преподаванием музыки (рояль) и демонстрацией физических опытов на публичных лекциях».

Впрочем, в те времена в университете посещение занятий было не очень строгим. Как откровенно признается И. В. Обреимов, «такая свобода посещения была важной и по другой причине. С 16 лет, т. е. первого курса университета, мне пришлось, как и многим студентам, зарабатывать не только на себя, но и на семью. Это было возможно только благодаря тому, что я мог слушать не все лекции и работать в лаборатории в удобное для себя время».

Примечательно, что еще на первом курсе, при выполнении лабораторного практикума по физике, Ивану Обреимову посчастливилось познакомиться с замечательным университетским профессором Дмитрием Сергеевичем Рождественским (1876–1940). Именно он – то и сумел разглядеть в любознательном и трудолюбивом студенте задатки будущего исследователя.

Способного первокурсника профессор приглашает поучаствовать в работе студенческого научного кружка, который курировал тогда известный университетский профессор Орест Данилович Хвольсон (автор первого отечественного многотомного «Курса физики», переведенного в дореволюционные годы на многие языки мира).

«Физический кружок был основан в 1906 году, т. е. это было дитя революции 1905 года, – уточняет в своих мемуарах И. В. Обреимов. – Официально кружком руководил профессор Орест Данилович Хвольсон...

Это было «официальное» руководство в том смысле, что защищало работу кружка от открытого полицейского надзора. До некоторой степени такой надзор осуществлял секретарь проректора: он утверждал повестку каждого заседания кружка. Средства кружка составляли членские взносы, на которые рассылались и печатались повестки. На остатки средств покупались книжки, являвшиеся собственностью кружка. Со стороны некоторых преподавателей физики (ассистентов и лаборантов) были попытки направить работу кружка в соответствии с учебным планом, но мы их не допускали в кружок. Кружок объединял студентов всех курсов, в него входили также «оставленные при университете для подготовки к профессорскому званию» (аспиранты). Темы занятий кружка отличались разнообразием. Часть тем предлагали студенты – дипломники».

Нельзя не вспомнить и тот факт, что авторитет университетского профессора физики О. Д. Хвольсона был настолько весом, что даже существовало неписанное правило: вновь назначенные преподаватели физики обязательно должны были приехать в Петербург, чтобы лично представиться Оресту Даниловичу.

«Совершеннейшим летописцем физики» называли современники Ореста Даниловича Хвольсона (1852–1934). Благодаря многотомному «Курсу физики», он приобрел поистине мировую известность.

На рубеже XIX–XX веков, по авторитетному замечанию Д. С. Рождественского, «буквально не было книг по нашей науке, где нечего было читать и где молодежь – я это испытал сам – не знала, как добраться до скудных знаний той поры». Поэтому – то по книгам О. Д. Хвольсона не одно молодое поколение постигало азы физики. В те же годы даже появился методологический термин – «хвольсоновский стиль изложения».

Первое издание четырехтомного «Курса физики» О. Д. Хвольсона было осуществлено издательством К. Л. Риккера в период 1897–1915 гг. В дальнейшем «Курс» выдержал семь изданий, каждое из которых было тщательно переработанным и дополненным. В 1923–1926 гг. вышло в свет последнее шеститомное издание.

Известно также, что Альберт Эйнштейн отзывался об этом энциклопедическом своде физических знаний как о «превосходном».

В историю же физической науки Орест Данилович Хвольсон вошел не только как блестящий её популяризатор, но и как талантливый исследователь. В его активе было также 40 научных работ, посвященных электрофизике, магнетизму, фотометрии, актинометрии, а также изучению солнечного излучения.

Со слов его современника Абрама Фёдоровича Иоффе, «Орест Данилович хорошо читал лекции и часто выступал с публичными лекциями... В молодости он работал в лаборатории Академии наук и мечтал сделаться ее членом, для чего, однако, значение его работ было недостаточным». Кстати, Орест Данилович и сам не стеснялся признавать, что главный его талант – это талант педагога.

В 1895 году Орест Данилович Хвольсон все же был удостоен звания члена-корреспондента Петербургской Академии наук. Рассказывают, что когда его избрали почетным членом Российской Академии наук (1920), то он остроумно заметил: «Разница между академиком и почетным академиком такая же, как между государем и милостивым государем».

Не меньшее влияние на научное формирование студента Ивана Обреимова оказал и Павел Сигизмундович Эренфест (*Ehrenfest*) (1880–1933), с именем которого связано становление современной теоретической физики в дореволюционном Петербурге.

Родившись в Вене, «образованность ума» он получил в Австрии и Германии. Своим учителем считал выдающегося австрийского физика-теоретика Людвиг Больцмана. Непродолжительное время жил в России. Последние двадцать лет своей недолгой 53-летней жизни прожил в Голландии, где возглавлял кафедру теоретической физики прославленного Лейденского университета, ранее которой руководил общепризнанный патриарх теоретической физики начала прошлого века Гендрик Антон Лоренц.

Кстати, по мемуарным воспоминаниям П. С. Эренфеста, «Россия могла бы стать моей Родиной в самом глубоком значении этого слова, если бы я смог получить здесь постоянную преподавательскую работу где бы то ни было».

Как ни парадоксально, но только два семестра (с 1 января 1909 года по 1 января 1910 года) он читал специальный курс дифференциальных уравнений для студентов старших курсов и лаборантов-ассистентов электромеханического факультета Политехнического института. (К слову: Эренфест был зачислен как временный преподаватель с оплатой за счет излишков институтского бюджета).

Всего лишь пять лет – с 1907 по 1912 гг. – прожил Павел Сигизмундович Эренфест в Петербурге. Наиболее лаконично подытожил эти годы академик Абрам Федорович Иоффе (один из самых близких его тогдашних друзей): «Со всей решительностью он выступал против формализма университетской физики, против ее вождей. Зато он и не смог добиться права преподавать в университете, хотя даже сдал там магистерские экзамены... В годы пребывания Эренфеста в Петербурге вокруг него группировалась вся талантливая молодежь. Именно это и сыграло главную роль в развитии современной теоретической физики в Петербурге».

Также и Ваня Обреимов активно участвовал в заседаниях неофициального городского физического кружка, основателем и руководителем которого был П. С. Эренфест. Вот что по этому поводу он припоминает: «Осенью 1912 года я был допущен еще в одну «конспиративную» организацию – в воскресный кружок Эренфеста. Этот кружок объединял всю творческую молодую физику Петербурга. Собирались члены кружка по воскресеньям у кого-нибудь в квартире (или в Малой физической аудитории Физического Института) с 10 до 12 часов».

### *Гёттингенский университет<sup>ii</sup>*

В 1913 г. ездил в г. Гёттинген, в лабораторию профессора Г. А. Таммана по командировке университета.

*Из автобиографии И. В. Обреимова*

В 1913 году Ивану Обреимову представился уникальный случай – пополнить свой багаж знаний за границей. По своей личной инициативе он написал письмо на имя гёттингенского профессора Г. А. Таммана, в котором запрашивал возможность поработать во время летнего семестра в его лаборатории. И ему повезло: профессор не возражал против летней стажировки. Правда, при одном условии – студент Обреимов должен был располагать средствами для оплаты обучения в Гёттингенском университете.

И тут ему снова улыбнулась удача: родной университет изыскал возможность предоставить талантливому студенту научную командировку за границу. В течение четырех месяцев пылливый паренек повышает свои знания и обучается экспериментальному мастерству в прославленном Гёттингенском университете. И надо полагать, что выбор Обреимовым именно этого университета был не случайным.

### **Историческая справка**

<sup>ii</sup> Гёттинген (Göttingen) – один из старейших немецких городов (земля Нижняя Саксония).

На рубеже XIX–XX веков Гёттингенский университет, основанный в 1734 году, был одним из авторитетнейших немецких университетов. К тому же, как заметил Генрих Гейне – один из выдающихся студентов этого университета, – Гёттинген «знаменит своими колбасами и Университетом».

Не менее красноречива и следующая характеристика университетского городка: «В самом городе – ни трамваев, ни автомобилей (почти), одни велосипедисты, да прохожие, наполовину по крайней мере студенты в пестрых шапочках различных корпораций и бюргершафтов [товариществ. – Прим. А.Т.] ..., целью которых является так же, как во время оно, совместное распивание пива, распевание песен и, конечно, “Mensur” [«Дуэль» (нем.). – Прим. А.Т.], т. е. нанесение «знаков отличия» на физиономии».

А по образному сравнению лауреата Нобелевской премии Макса Борна, Гёттинген был привлекателен для европейских студентов и как «Мекка немецких математиков». К тому же, по его словам, «студенты кочевали по университетским городам, проводя лето в каком-нибудь маленьком университете, чтобы насладиться природой и спортом, а зиму – в больших городах с их театрами, концертами... Еще со времен Гаусса и Вебера в Гёттингене стало традицией, что математика и физика развиваются не параллельно, а вместе. Клейн особенно энергично охранял эту традицию, расширив ее привлечением технических наук».

Символичен и следующий факт: второе десятилетие прошлого столетия было ознаменовано становлением новой квантовой механики и определено как «гёттингенский период истории физики».



Окончив к осени «свои университеты» в Европе, Обреимов возвращается на родину и приступает к выполнению дипломной работы, руководителем которой по его просьбе согласился стать профессор Д. С. Рождественский.

В 1915 году он получает предложение остаться при *alma mater* для «приготовления к преподавательской и профессорской деятельности», что соответствует теперешней аспирантуре. Более того – профессор Д. С. Рождественский предлагает ему занять место своего личного ассистента.

Университетская карьера в начале прошлого века предоставляла единственный путь для проведения научной работы. Правда, за свой счет. Поскольку «вузы России, как известно, были бедны. Жалованье и профессора, и преподаватели получали только за учебную работу... При университете оставляли со стипендией людей, которые подавали надежды быть хорошими преподавателями, демонстраторами, но не исследователями. Исследовательская работа, повторяю, государственными средствами не оплачивалась».

Много лет спустя академик Иван Васильевич Обреимов любил с удовольствием рассказывать о своей насыщенной судьбоносными событиями молодости, и, как правило, всегда с большим уважением отзывался о своем первом наставнике – академике Дмитрие Сергеевиче Рождественском.

Кстати, не считал Иван Васильевич зазорным и откровенничать. Так, например, всегда с улыбкой вспоминал, что «Дмитрий Сергеевич был очень радушен. В квартире на Волховском по воскресеньям в час дня подавали завтрак, состоящий из пирога с капустой и чая. Всех, кто приходил в это время, угощали завтраком. Студентом я из озорства как-то придумал предлог и зашел к Рождественскому домой после воскресного кружка, меня угостили пирогом с капустой. И после я частенько у него обедал, ездил к нему на дачу и всегда бывал радушно принят».

Его память сохранила и следующие факты: «Он всегда был уверен в себе. То, что ему было трудно (даже в смысле физической выносливости), он считал невозможным для других. Это его свойство иногда сильно раздражало окружающих и восстанавливало против него. В 1918 году в Ленинграде было голодно. Некоторые и сейчас не могут себе представить, что сидеть на одной картошке с солью в течение одного–двух месяцев – очень большое лишение.  $\frac{1}{4}$  или  $\frac{1}{8}$  фунта хлеба в день в этих условиях было заметным подспорьем к картошке».

Мы, ученики Дмитрия Сергеевича, всячески старались помочь ему, чтобы он и его семья как можно лучше питались (например, мы выхлопотали ему у Петросовета три рабочих пайка). Впоследствии Дмитрий Сергеевич говорил:

– Как я доволен, что поголодал. Я узнал, какая масса вкусных вещей существует. Например, до сих пор я не ел малороссийского сала, а ведь это очень вкусная вещь».

И, по-видимому, всё-таки здорово повезло студенту Ивану Обреимову. Ведь не каждому вначале жизненного пути повстречается замечательный наставник.

### **«Было решено создать собственные оплотехнику и оптическое стекло»**

Я вместе с Рождественским переходили сначала в Комиссию по изучению естественных производительных сил (КЕПС) Академии наук, а затем во вновь организованный Советской властью Государственный оптический институт.  
*Из автобиографии И. В. Обреимова*

Начало научной деятельности Ивана Обреимова совпало с необратимыми изменениями внутри страны. Многих его сверстников унесла первая мировая война, революция, гражданская война. Но ему посчастливилось не только остаться в живых, но и внести свою лепту в становление и развитие отечественного оптического приборостроения.

А начинался этот нелегкий путь в большую науку, с его слов, так: «Осенью 1915 г. произошло событие, сказавшееся на дальнейшей судьбе Д. С. Рождественского и моей судьбе. Было решено создать собственные оплотехнику и оптическое стекло (на Императорском фарфоровом и стекольном заводе). Генерал Струков пригласил в качестве консультанта Дмитрия Сергеевича, а Д. С. Рождественский в свою очередь меня своим ассистентом с жалованьем из личных средств 100 рублей в месяц...»

Дмитрий Сергеевич поручил мне наладить основную измерительную технику, создать иммерсионный метод для экспрессного измерения малых разностей показателя преломления на обломках стекла...

В течение двух с половиной лет через мои руки проходили все стандартные измерения по оптическому стеклу».

Уместно пояснить вкратце приведенную выше цитату. Дело в том, что во время первой мировой войны оснащение царской армии военными оптическими приборами было резко подорвано, поскольку именно Германия тогда была мировым монополистом в области производства оптического стекла. В России же отсутствовала собственная оптическая промышленность. Сборка оптических приборов осуществлялась из заграничного оптического стекла и с помощью импортного оборудования на трех заводах: на базе оптических мастерских Обуховского завода и сборочных мастерских заводов Цейсса и Герца.

Поэтому неудивительно, что «во время первой мировой войны оказалось, что Россия полностью зависит в оптике от Германии. У нас не было оптических заводов, не умели делать оптическое стекло, не умели проектировать оптические приборы...

За оптическое стекло Германия получала от нас хлеб... Говорили, что за тонну оптического стекла Германия получала вагон или несколько вагонов зерна.

При таких условиях началась в тогдашней России борьба за оптическое стекло. И, несомненно, главные усилия и главные успехи были связаны с именем Д. С. Рождественского. Он связался с бывшим императорским заводом; он там присутствовал при первых опытах над варкой оптического стекла, он подбирал всю ту, тогда молодую ныне почтенную ячейку, которая взялась за это дело и довела его до современного состояния».

И надо признать, что именно недостаток военной оптики заставил тогда власть имущих поставить на государственном уровне вопрос о создании отечественной оптической базы. Роль же научного куратора выпала на долю профессора Д. С. Рождественского.

В апреле 1918 года исключительно благодаря энергии и научно-организационным хлопотам Д. С. Рождественского был создан и *Отдел оптотехники* на базе Подкомиссии по микроскопии КЕПС, выделившийся вскоре в самостоятельное научно-исследовательское учреждение – *Государственный оптический институт* (далее – ГОИ). Организация ГОИ была поручена инициатору его создания – Д. С. Рождественскому.

Представляется возможным непредвзято реконструировать предысторию его создания по воспоминаниям И. В. Обреимова: «Осенью 1918 г. Дмитрий Сергеевич объявил мне, что завод стал на консервацию, платить ему мне не из чего, и я должен сам искать себе место. Это тоже было отличительной чертой Д. С. Рождественского – он не привязывался к людям. У него была одна привязанность – Ольга Антоновна, и эта привязанность исчерпывала все.

Я настолько хорошо его знал, что не возмутился, не огорчился, а просто напомнил ему, что положение в стране не такое, чтобы можно было легко найти себе место, и что он обязан что-нибудь предпринять. Он перевел меня на должность «оставленного при университете со стипендией».

Одновременно со мной Дмитрию Сергеевичу надо было устроить и других людей. При Комиссии естественных производительных сил Академии наук Д. С. Рождественскому (в то время молодому профессору – ему было тогда 42 года) удалось создать Коллегию по оптотехнике...

Через несколько месяцев мы нашли другой выход.

Осенью 1918 г. Советское правительство обратилось к доктору М. И. Неменову с предложением основать медицинский исследовательский рентгенологический институт. М. И. Неменов в свою очередь обратился к А. Ф. Иоффе с предложением сотрудничать с ним и основать институт, как теперь сказали бы, комплексный с тремя отделениями: медицинским, физическим и отделением радиоактивности.

А. Ф. Иоффе просил Д. С. Рождественского присоединиться для участия в создании четвертого, оптического отделения...

В общем, сразу было видно, что комплексный институт не устроил бы ни одного из его организаторов, но споры об его образовании привели Д. С. Рождественского к решению о необходимости создания самостоятельного оптического института. В этом он убедил советское правительство. 15 декабря 1918 года было принято постановление Народного комиссариата просвещения об организации ГОИ».

Согласно этому постановлению в задачи института входило «научное исследование производства и свойств оптического стекла», «содействие оптической промышленности в России», «научное исследование всех вопросов, касающихся лучистой энергии», «распространение оптических знаний среди специалистов и в широких массах».

В составе ГОИ было предусмотрено два отдела – научный и технический.

Становление же института проходило в крайне тяжёлые годы. Первая мировая война, революция, гражданская война и интервенция породили в стране разруху, голод и холод. Оттого в те времена всё было проблемой: и приборы для экспериментов, и продукты питания, и одежда, и даже бумага.

Приведенные ниже извлечения из правительственных документов того времени позволяют более наглядно обрисовать некоторые реалии той эпохи.

#### Проект декрета СНК об улучшении положения научных специалистов

23 декабря 1919 г.

*В целях сохранения научных сил, необходимых для социалистического строительства, для поднятия производительности народного хозяйства и культуры, а также наиболее целесообразного обеспечения нужд рабоче-крестьянской обороны Совет Народных Комиссаров постановляет:*

1. *Предоставить усиленное довольствие наиболее выдающимся специалистам тех отраслей, которые являются существенными для разрешения указанных выше задач.*

2. *Освободить этих специалистов от всякого рода повинностей (трудовой, военной и т. д.), не имеющих отношения к их научным занятиям.*

3. *Создать для научной работы этих специалистов жилищные условия, обеспечивающие их минимальными, безусловно для такой работы необходимыми удобствами...*

Постановление Центральной комиссии по улучшению быта  
научных специалистов при Совнаркомом  
об увеличении количества пайков научным специалистам Петрограда и Москвы  
и о выдаче им обуви и одежды

17 мая 1920 года

*3. Выдавать научным специалистам как Москвы, так и Петрограда, кроме продовольственных пайков, по одной паре обуви, одному костюму (или материи на костюм), три пары белья (или материи на белье) и шести пар носков (или чулок) в год. Что касается теплого платья, то такое выдавать отдельным лицам лишь в зависимости от степени нуждаемости в нем.*

И, по-видимому, так же не зря в числе прочих тогдашних лозунгов был и следующий: *«Научиться ценить науку, отвергать “коммунистическое” чванство дилетантов и бюрократов».*

Понятно поэтому, что проблем у первого директора ГОИ было предостаточно. Но кроме бесчисленных научно-организационных сложностей, главные затруднения были с кадрами. Ныне имеет смысл несколько подробнее остановиться на одном из наиболее действенных его нововведений. А чтобы не погрешить против истины, процитируем по этому поводу воспоминания одного из первых сотрудников института А. И. Стожарова: *«Мне было 18 лет, когда меня привлекли к работе в организовавшийся тогда Государственный оптический институт... Довелось поговорить с Дмитрием Сергеевичем. Он сказал следующее: «Я предлагаю вам поступить в организуемый нами новый Оптический институт. Вы должны будете энергично учиться, чтобы подготовиться к научной работе. От вас требуется обещание в течение двух лет не уходить из Оптического института, слушать лекции по моему указанию и обязательно вовремя сдавать экзамены. Я обеспечу вас продуктовой рабочей карточкой и буду добиваться отсрочки от призыва в армию. Думаю, что через два года вы уже сами не захотите уходить от нас».*

Таким образом, была организована, я бы сказал, первая аспирантура в Советском государстве... Полное название нашей должности было: младшие лаборанты при мастерских ГОИ».

Безусловно, острую нужду в квалифицированных кадрах испытывали тогда многие учебные и научные учреждения. Поэтому нельзя не осознать эффективность упомянутого выше сотрудничества ГОИ с университетом.

Заслуживает внимания и следующая особенность научно-организационной «кухни» ГОИ тех лет, рассказанная И. В. Обреимовым: *«Возник вопрос, где размещать Оптический институт? На первых порах решили: в здании Физического Института университета. Помогла случайность. Во двор университета вклинивалось кирпичное здание конфетной фабрики Колесникова. Осмотреть фабрику отправились Архангельский и я... С помощью топора мы открыли ворота...*

Осмотрели фабрику и доложили Д. С. Рождественскому, что нашли пригодное для работы помещение. Здание фабрики было передано Оптическому институту... Чтобы придать зданию более красивый вид, было предложено использовать несколько плит из красного песчаника, взятых из бывшей ограды Зимнего дворца».

А приведенная ниже цитата из доклада Д. С. Рождественского на первом годичном собрании ГОИ (от 19 декабря 1919 г.) обнаруживает принципы и методы научно-организационной работы тех лет: *«Оглядываясь на минувший год, мы с глубокой благодарностью вспоминаем о той поддержке, которой обязаны Петроградскому университету. В его Физическом институте зародилась наша деятельность и протекал первый год работы... Из университета мы черпаем свежие силы, молодых начинающих сотрудников, из университета черпаем ту науку, которая, как я говорил выше, нам нужна, как воздух. У нас не было в достаточном количестве необходимых приборов. Вследствие закрытия границы наш сотрудник проф. В. А. Анри не мог привести в Петроград все, что было заказано за границей... Часть приборов ревностные и настойчивые сотрудники института разыскали в России. Все это мы смогли осуществить только благодаря энергичной поддержке Комиссариата народного просвещения. Он пошел навстречу идее научно-технического учреждения не только большими, подчас выходящими из всякой нормы, средствами, но и активным содействием, в котором фактическое осуществление ставилось всегда выше формы, буква закона преступалась, если от этого выигрывало дело. Мы должны принести искреннюю благодарность Комиссариату за то, что он дал нам возможность в короткий срок увидеть воплощение дорогой для нас мысли».*

Стоит также описать факты, связанные с Д. С. Рождественским, которые непосредственно освещают объективные причины резкого перелома научной судьбы его молодого соратника И. В. Обреимова.

Со слов Ивана Васильевича, *«Дмитрий Сергеевич был полон замыслов. Его увлекало многое, в том числе квантовая теория. Помню его прекрасный доклад о ротационном инфракрасном спектре воды, который он сделал как-то на воскресном кружке.*

После доклада, который заинтересовал всех нас, он с жаром говорил мне:

– Вы представляете себе, если сравнить спектр поглощения паров бензола и кристалла бензола, то ведь в кристалле бензола ротационной структуры не должно быть!

Эта мысль окрылила меня. Я пришел к выводу, что спектр кристаллического бензола надо исследовать при низких температурах... Я предложил Д. С. Рождественскому поставить его эксперимент с бензолом, но получил неожиданный отпор. Дмитрий Сергеевич «забыл» свои мысли. Мало того, в самых резких тонах он запретил

мне заниматься экспериментом. «Спектроскописту нечего делать с конденсированной фазой. Я не могу допустить, чтобы государственные деньги тратились на глупости». Когда я напомнил ему, что мысль об эксперименте принадлежит ему, он категорически отверг это. Я убеждал его в том, что окрашенные кристаллы изменяют свою окраску при температуре жидкого воздуха. Он ответил:

– Что же в этом особенного? Еще Дьюар это отметил.

Беседа, внешне проходившая мирно, закончилась ультиматумом:

– Или Вы будете делать то, что я Вам скажу, или уберите вон. Выбирайте!

– Конечно, я выбираю второе.

– То есть остаешься?

– Нет, уйду.

– Ну и уберите вон!

Я поделился с А. Ф. Иоффе идеей о спектре кристаллов при низких температурах, получил его одобрение и пригласил себе в помощники студентку физико-математического факультета Политехникума Тосю Прихотько (ныне действительный член Академии наук УССР)...

Я обратился к своим друзьям в Оптическом институте ..., и они отчасти под влиянием энтузиазма и обаяния А. Ф. Прихотько стащили небольшой по размерам, но очень хороший спектрограф..., и мы, с А. Ф. Прихотько на санках и в трамвае доставили его в Лесной. С помощью этого спектрографа были сделаны первые наблюдения над спектрами кристаллов при температуре жидкого воздуха, и (о радость!) в спектре кристаллов азобензола в жидком воздухе появилась структура – широкие полосы».

Вот так неожиданно Иван Васильевич Обреимов и стал научным сотрудником упомянутого выше *Государственного физико-технического рентгенологического института* (здесь и далее ЛФТИ – Ленинградский физико-технический институт), первым директором и организатором которого был Абрам Федорович Иоффе.

### **«Работать под руководством А. Ф. Иоффе было легко»**

В 1924 г. перешел из Оптического института  
в Ленинградский физико-технический  
институт (академика А. Ф. Иоффе), где работал до 1929 г.  
*Из автобиографии И. В. Обреимова*

В 20-е годы прошлого столетия ЛФТИ переживал тяжелейшую пору своего становления. В качестве показательного примера стоит процитировать весьма откровенное письмо молодого директора ЛФТИ А. Ф. Иоффе, адресованное его зарубежному другу П. С. Эренфесту.

18 июня 1920 г., Петроград

Дорогой друг!

Надеюсь, что это письмо дойдет до тебя, а поэтому спешу (сейчас 1 час ночи, а завтра в 9 утра надо сдать письмо) сказать главное. Мы прожили тяжелые годы и многих потеряли, но сейчас начинаем снова жить. Научная работа у нас идет все это время. Все физики сконцентрированы в 2 институтах: рентгеновский (мой) и оптический (Рождественского), а в Москве – биологической физики (Лазарев) и университет (Романов). В каждом человек по 20. Работаем много, но закончено пока немного, так как год ушел на организацию работы в новых условиях, устройство мастерских и борьбу с голодом. Сейчас главная наша беда – полное отсутствие иностранной литературы, которой мы лишились с начала 1917 г. И первая, и главная моя просьба к тебе – выслать нам журналы и главные книги по физике...

Вторая просьба – написать о том, чем живет современная физика и ты, в частности. Мы здесь целиком поглощены строением атома и молекул...

Третья просьба к тебе – не сердись, что редко писал... Живем в Политехническом. Студентов мало, но лекции идут. Меня выбрали в академию...

Итак, жду письма и книг.

Твой далекий друг А. Иоффе

Заметим, что в течение первых трех десятилетий прошлого века П. С. Эренфест пользовался исключительным авторитетом как у теоретиков, так и у экспериментаторов всего мира. В числе его самых близких друзей были такие титаны современной физики, как Альберт Эйнштейн и Нильс Бор.

Явно не зря и сам А. Эйнштейн искренне признался в письме к П. Эренфесту: «Я редко встречаю людей, с которыми мне бывает хорошо. Я нуждаюсь в твоей дружбе еще больше, чем ты в моей».

Но самое главное – Эренфест был необыкновенно щедр на помощь. Имеется возможность процитировать по этому поводу чрезвычайно примечательное письмо П. Эренфеста к А. Эйнштейну: «Я очень надеюсь, что ты, наконец, сможешь познакомиться с моим дорогим, дорогим Иоффе. Он очень тонкий физик и человек. Во всяком случае, ты получишь много удовольствия от этого знакомства. Наряду с моей женой, тобой и Бором он

принадлежит к числу моих ближайших друзей, и, возможно, нет другого такого человека, который высказывал бы по отношению ко мне больше любви».

Кстати, П. С. Эренфест принимал самое деятельное участие в налаживании международного научного сотрудничества. Так, спустя годы А. Ф. Иоффе в своих мемуарах специально заметит: «Когда в начале 1921 г. мы с Д. С. Рождественским и А. Н. Крыловым приехали за границу, выполняя поручение В. И. Ленина о восстановлении научных связей, решающую помощь нам оказывал Эренфест, имеющий широкие связи среди заграничных ученых. Он даже мобилизовал их на сбор для советских библиотек физических книг и журналов, вышедших во время блокады».

Добавим, что именно П. С. Эренфест содействовал и научной стажировке наиболее перспективных молодых сотрудников ЛФТИ в ведущих физических центрах мира. В частности, именно благодаря его хлопотам физтеховец Иван Васильевич Обреимов получил возможность в 1927 и 1928 гг. проводить научные исследования по спектроскопии кристаллов при низких температурах в знаменитой Лейденской криогенной лаборатории.

По этому поводу примечательна выдержка из лейденского письма П. С. Эренфеста, адресованного А. Ф. Иоффе: «Криогенная лаборатория только что получила 100 000 долларов из фонда Рокфеллера<sup>iii</sup> на проведение работ при низких температурах [Здесь и далее курсивом выделено Эренфестом. – Прим. А.Т.] В соответствии с этим (это сообщение только для А. Ф.!) здесь очень заинтересованы в таких криогенных работах, которые должны быть проведены в наступающем году и которые бы продемонстрировали, что если только Лейден берет на себя «холод», то наиболее высококвалифицированные специалисты со всех частей света проводят свои специальные низкотемпературные исследования только в Лейдене, где они могут располагать наиболее совершенной техникой.

Я прошу А. Ф. продумать какую-либо красивую работу, которую можно было бы (после подготовки при комнатной температуре и в жидком воздухе) в течение двух месяцев полностью проделать в (жидком) водороде или гелии. Может быть, что-либо, касающееся свойства деформации сверхпроводящих монокристаллов в точке перехода».

И по большому счету, только благодаря хлопотам П. С. Эренфеста А. Ф. Иоффе имел возможность ежегодно с 1921-го по 1933 г. посещать передовые физические центры мира. Вот что об этом рассказывал позднее сам Абрам Федорович: «Начиная с 1921 г., я почти ежегодно бывал за границей с целью использования заграничного опыта, выяснения важнейших научных вопросов, дискуссий, консультаций и т. д. В крупнейших университетах: Париже, Берлине, Геттингене, Лейдене, Кембридже, в 15 американских университетах и во всех крупных заводских лабораториях я читал доклады и лекции. В Калифорнийском университете и Бостонском технологическом институте я читал систематические курсы. Благодаря этому я мог на деле познакомиться с организацией научной работы и преподавания в университетах и промышленных предприятиях Запада и Америки».

Вместе с тем эти годы были ознаменованы и рядом принципиально важных научно-организационных мероприятий в стенах ЛФТИ, истоки которых были известны лишь узкому кругу приближенных к А. Ф. Иоффе.

На примере исключительно откровенных воспоминаний Ивана Васильевича Обреимова, который не стоял в стороне от ключевых институтских событий, возможно более конкретно реконструировать этот период становления ЛФТИ: «Летом 1924 г. А. Ф. Иоффе «выкинул номер». Все руководство института – А. Ф. Иоффе, его заместитель А. А. Чернышев и помощник Н. Н. Семенов<sup>iv</sup> – одновременно собралось в отпуск. Абрам

---

#### ***Историческая справка***

<sup>iii</sup> Рокфеллеровский фонд был создан в мае 1913 г. с целью «содействия процветания человечества во всем мире». Основатель фонда – Дж. Д. Рокфеллер (Rockefeller)-старший (1839-1937), родоначальник американской династии промышленников и финансистов.

Фонд субсидировал научные стажировки молодых перспективных ученых (как правило, одногодичные), оказывал финансовую поддержку научным институтам (например, *Институту теоретической физики* Н. Бора в Копенгагене, *Лаборатории низких температур* Г. Камерлинг-Оннеса в Лейдене), оплачивал научные командировки ведущих ученых мира (в частности, их лекционную работу).

Так, к примеру, в период с 1924-го по 1928 г. было выделено 427 стипендий, из них одну треть получили физики, 1/3 - биологи, а остальная часть была поделена между химиками и представителями сельскохозяйственных наук.

Стипендиатами Рокфеллеровского фонда были и сотрудники ЛФТИ: Я. И. Френкель (1925-1926 гг.), Ю. А. Крутков (1926-1927 гг.), В. А. Фок (1927-1928 гг.), К. Д. Синельников (1928-1930 гг.), Д. В. Скобельцын (1928-1930 гг.), Г. А. Гамов (1929 -1930 гг.) и Л. Д. Ландау (1930-1931 гг.).

<sup>iv</sup> Семенов Николай Николаевич (1896-1986) – физикохимик, заместитель директора ЛФТИ с 1921-го по 1928 г., организатор и первый директор Института химической физики (1931), академик (1932), академик-секретарь Отделения химических наук АН СССР (1957-1963), вице-президент АН СССР (1963-1971). В 1956 г. присуждена Нобелевская премия (совместно с английским физикохимиком С. Н. Хиншелвудом) за исследования механизма химических реакций.

Федорович предложил мне место своего помощника (вместо Н. Н. Семенова). Через несколько дней после моего назначения все уехали...

Я остался один, и. о. директора...

В этом, если хотите, был тоже стиль А. Ф. Иоффе. Он давал общее направление, «первый толчок», а дальше во всем доверял. Работать у него в подчинении было морально легко. Не сказал бы, что легко и физически, ибо инициатива, которую давал Абрам Федорович требовала напряженной работы...

К осени 1924 г. внутри института создалась небольшая дружная группа... Сюда определенно не входили В. Р. Бурсиан<sup>v</sup> и Я. И. Френкель. В одной из частных бесед Н. Н. Семенов обратил внимание на то, что ЛФТИ «держится» на личном авторитете А. Ф. Иоффе. Но при несчастной случайности будет просто назначен новый директор, который придет со своими людьми и может аннулировать хорошие традиции института. Семенов считал правильным разбить ЛФТИ на лаборатории во главе с основными работниками, тем самым официально закрепить за ними право влиять на судьбу ЛФТИ. Когда мы пришли с этим к А. Ф. Иоффе, он страшно покраснел, но согласился. Так Физико-технический институт был разбит на несколько лабораторий... Лаборатория кристаллов – И. В. Обреимов».

Ивану Васильевичу Обреимову все-таки сопутствовала удача, поскольку следующее стечение обстоятельств также сыграло знаковую роль в его научно-организационной карьере: «Наши просьбы о субсидировании, обращаемые к Научно-техническому управлению (НТУ) или к другим организациям ВСНХ<sup>vi</sup>, все учащались. Иногда мы получали бюрократические ответы, например: «Переходите из Главнауки в ВСНХ, тогда денег дадим при условии, что все имущество приобретенное на эти деньги будет наше»... Подобные обстоятельства привели Н. Н. Семенова к мысли: не надо ли вообще перевести институт из Главнауки в НТУ ВСНХ...

По этой причине был назначен «полный сбор» в Москве. Выехали все заместители А. Ф. Иоффе – Чернышев, Семенов, и я... В течение нескольких дней вопрос был выяснен, и только тогда приехал Абрам Федорович для разговора на высшем уровне. Мы вернулись в Ленинград с разрешением на организацию нового института, который в отличие от Физико-технического института Главнауки назывался Ленинградская физико-техническая лаборатория (ЛФТЛ). Директором обоих институтов стал А. Ф. Иоффе, его заместителем по обоим институтам – А. А. Чернышев, заместителем по ЛФТЛ – Н. Н. Семенов, заместителем по ЛФТИ – И. В. Обреимов».

Вместе с тем нельзя недооценивать и дальновидность кадровой политики первого директора ЛФТИ. Абрам Федорович Иоффе в то время открыл немало молодых талантов. Недаром, кстати, ЛФТИ в период становления называли «детским садом папы Иоффе».

И как ни странно, а прогрессирующую уже тогда «болезнь роста» ЛФТИ усмотрел именно его далёкий лейденский друг П. С. Эренфест.

П. С. Эренфест – А. Ф. Иоффе

13 апреля 1928 г.

Мой дорогой друг!

...Позволь мне высказать некоторые *возражения* по поводу твоего плана забрать к себе Мандельштама и Тамма. Конечно, я прекрасно понимаю, насколько важно, во-первых, создать этим двум превосходным физикам благоприятные – по возможности – условия работы, вместо того чтобы бесполезно растрачивать их силы. Тем более, что они не только превосходные физики, но и *совершенно превосходные* люди. Я могу, во-вторых, очень хорошо и по достоинству оценить, что будет означать приход обоих этих людей, с их огромной *ясностью* мышления (!!!) и – в случае Тамма – с блестящей энергией и изобретательностью, в вашу группу для обучения лучших из молодежи. Но я все же должен тебе сказать, в чем суть моего возражения. Эта огромная концентрация внушает мне чувство глубокого страха. Французская революция сконцентрировала все в Париже; сравни теперь ситуацию там с тем, что имеет место в Германии. Одним из смертельнейших ядов такой концентрации является то, что кучка постаревших людей владеет абсолютно всем. В лучшем случае это люди, которые в молодости сделали нечто совершенно выдающееся, но зачастую и этого не бывает. Жизнь молодежи становится

### Историческая справка

<sup>v</sup> Бурсиан Виктор Робертович – первый ученый секретарь ЛФТИ, первый заведующий кафедрой теоретической физики физико-механического факультета Петербургского политехнического института.

<sup>vi</sup> Высший Совет Народного Хозяйства (ВСНХ) образован 5 декабря 1917 г. В его задачи входило проведение национализации промышленности, плановая организация народного хозяйства. После осуществления декрета о национализации – высший центральный орган по управлению народным хозяйством, главным образом промышленностью.

В связи с правительственным курсом на индустриализацию страны были произведены изменения в организации и руководстве промышленностью и научно-исследовательской работой. В 1926 г. в системе ВСНХ созданы Научно-техническое управление (НТУ), комитеты и управления по отраслям промышленности. В состав НТУ вошли отраслевые научно-технические советы и институты.

ВСНХ СССР руководил промышленными предприятиями союзного значения, ВСНХ союзных республик – остальными. Впоследствии ВСНХ СССР был реорганизован в 3 наркомата: тяжелой, легкой и лесной промышленности.

тогда адом. *Здоровое* развитие она может получить лишь в *децентрализованных* местах, заполненных сотрудниками только наполовину... Это *зло* ужасно, потому что проявляется оно очень медленно. Но это – смертельный яд!

То, что молодежь получает высшее образование в одном, двух центрах, — это очень хорошо, но затем она должна иметь возможность развернуться в процессе самостоятельной деятельности в децентрализованных местах, обеспеченных научными работниками не в полной мере.

Ну, а теперь немножко о другом, что стало заметным за последнее время! Централизация приводит к возникновению «тяжелых институтов», «солидных организаций», в которые тот, кто их создает и организует, умеет на долгое время – и по всем отраслям – вдохнуть истинную жизнь. Ведь в большей или меньшей степени это плоть, которую создает его душа! Но нередко эти институты становятся для их создателей проклятием. «Тяжелые институты» наиболее правильно следовало бы – с психологической точки зрения – рассматривать как некие «гигантские игрушки», которые мальчик 50 лет позволяет себе подарить или купить. Мальчишеское упрямство мешает ему отшвырнуть их даже тогда, когда они становятся для него невыносимыми, когда они начинают обкрадывать ядро его собственного «я»...

Мой дорогой Иоффе! Я очень хорошо знаю, что все это ты говорил себе сам, однако ты все же считаешь, что должен избрать путь концентрации и размаха. Но в том, что я тебе еще раз об этом написал, быть может, все-таки есть смысл. Возможно, ты позаботишься тогда и о том, чтобы кое-что из этого отрицательного последствия было уменьшено.

Пожалуй, ты уже сейчас в некоторой степени сможешь провести подготовку к тому, чтобы по-настоящему хорошее пополнение тяготело бы не к Ленинграду, а смогло рассчитывать на удовлетворительные условия для развития в периферийных местах. Особенно это относится к математикам и физикам-теоретикам. Но и в их случае нужно, чтобы это происходило в *дружеском* контакте с тобой...

Прости за это, несомненно, неприятное для тебя письмо. Во всяком случае оно показывает тебе, с каким вниманием я отношусь к твоим планам...

Абрам Федорович, объективно оценив искренность замечаний и пожеланий своего друга, вскоре принимает судьбоносное решение: «С 1929 г. выделил из Физико-технического института такие же институты для Томска, Харькова, Днепропетровска и Свердловска» (Из автобиографии А. Ф. Иоффе).

Иван Васильевич Обреимов был направлен в Харьков. Его мемуарные заметки, являются историческим источником, откуда можно почерпнуть подробности тогдашних судьбоносных событий: «У нас в стране было всего два центра физической науки – Ленинград и Москва, и они «переманивали» многих хороших физиков из провинции...

Началась пропаганда того, что научные центры, и в частности крупные физические центры, надо строить в провинции в организованном порядке.

Институт получил два предложения: одно – открыть физико-технический институт в Свердловске, другое – усилить кафедру физики в Томске и создать на ее основе физико-технический институт.

Насколько идея рассредоточения физики встретила всеобщее сочувствие, настолько конкретный вопрос – кто поедет осваивать новые места – оказался трудным...

Когда я сообщил своей жене, Екатерине Александровне Пузино, о том, как проходит организация новых центров, она мне сказала: «Все твои молодые коллеги, которых ты так хвалишь, в действительности мало чего стоят. Они мастера критиковать. Но теперь, когда им дана возможность строить институты так, как они считают нужным, они дрейфят, не желают рисковать. Они предпочитают критиковать готовенькое». Я возразил: «Имей в виду, большую роль играют жены, которые не хотят уезжать из Ленинграда. Ведь если бы мне предложили уехать в провинцию, ты бы первая возрадила». – «И ничего подобного. При условии, если разрешат строительство института на новом месте, я бы советовала тебе ехать».

На следующий день я сказал А. Ф. Иоффе: «Если никто не желает ехать в Свердловск, то я согласен». – «Нет, – ответил он, – Вы должны оставаться здесь». Вскоре я уехал в Лейден, там окончил свою работу по спектрам кристаллов при низких температурах и стал работать на заводе Хука в Схидаме, где изготавливалась машина жидкого водорода для ЛФТИ.

Неожиданно в октябре 1928 г. получаю от А. Ф. Иоффе телеграмму: «Выезжайте немедленно организовывать Харьков». Я ответил: «СОС пятьсот». Получив свои «СОС пятьсот», я вернулся в Ленинград и на следующий день выехал в Харьков, взяв с собою П. И. Стрельникова и А. И. Лейпунского».

#### *Феномен УФТИ*

В 1929 году приказом по ВСНХ УССР был назначен директором вновь организуемого Украинского физико-технического института в г. Харькове.  
*Из автобиографии И. В. Обреимова*

Правительство Украины с признательностью и должным вниманием отнеслось к предложению вице-президента АН СССР академика А. Ф. Иоффе создать Украинский физико-технический институт в Харькове. В этой связи примечательна выдержка из Постановления заседания коллегии Научно-технического управления ВСНХ УССР от 16 мая 1928 г.:

«Слушали: Об организации ФТИ на Украине. Доклад акад. А. Ф. Иоффе.  
Постановили:

1. Признать организацию Физико-технического института на Украине необходимой.
2. Иметь в виду, что Физико-технический институт должен вовлечь в свою работу научно-технические силы Украины и установить тесную связь с заводскими лабораториями, научно-исследовательскими учреждениями ВСНХ и Наркомпроса, считать необходимым организовать институт в Харькове...
5. Просить академика Абрама Федоровича Иоффе взять на себя обязанности председателя научно-технического совета института.
6. Для проведения всей подготовительной работы по организации Физико-технического института утвердить организационное бюро во главе с проф. Обреимовым, в составе профессоров Штейнберга, Желиховского, Рожанского, Перезовного, а также представителей от НТУ Украины и Укрглавнауки.
7. Выразить благодарность академику А. Ф. Иоффе за проявленную им инициативу в деле развития научно-исследовательской работы на Украине, в частности, отметить с удовлетворением выдвижение Ленинградским физико-техническим институтом группы высококвалифицированных научных работников для работы в Украинском физико-техническом институте».

В период становления УФТИ Иван Васильевич Обреимов, будучи еще только руководителем оргбюро, входил во все детали постройки института, продумывая план строительства УФТИ с ведущими специалистами. Так, в частности, «к строительству института И. В. Обреимов привлек талантливых архитекторов П. И. Сидорова и В. И. Богомолова. Проект фундамента и нулевой цикл научного корпуса и жилого дома были выполнены за 2 недели. Пока их строили, за 4 недели был полностью готов остальной проект зданий. В качестве перекрытий были использованы конструкции с затонувшего в Севастопольской бухте и поднятого в 1928 г. корабля «Императрица Мария». Параллельно проводили испытания на огнестойкость камышита, из которого были построены стены библиотеки и конференц-зала (камышит оказался негорючим). Крыша криогенной лаборатории была установлена на рельсах. При взрыве в 1943 г. гитлеровцами здание устояло, а крыша поднялась и опустилась, взрывная волна не разрушила здания, функционирующего и по сей день».

И недаром впоследствии газета «Известия» от 11 ноября 1932 года в очерке Ф. Кандыбы «Снайперы атомного ядра» рапортовала: *«Харьковский институт действительно строился темпами пятилетки и за девять месяцев был выстроен. Директор института профессор Обреимов разъезжал по Европе, закупая и заказывая самое лучшее, новейшее оборудование для лаборатории».*

Примечательные подробности о начальном периоде становления института можно почерпнуть из воспоминаний Ивана Васильевича Обреимова: «Группу физиков, выехавших в Харьков, провожали с помпой: на вокзале играл оркестр, слышалась дробь барабанов, плескались знамена. В эту группу входили: К. Д. Синельников, А. К. Вальтер, Н. А. Бриллиантов, А. Ф. Прихотько, В. С. Горский, В. Гей, Г. Д. Латышев, В. Волейко, П. И. Стрелков, А. И. Лейпунский (мой заместитель), Л. В. Розенкевич (теоретик), Г. Горовиц (теоретик). В становлении института, который получил название «Украинский физико-технический институт» (УФТИ), приняли участие В. А. Фок и Л. Д. Ландау, хотя они и не собирались жить в Харькове, и П. С. Эрэнфест, который серьезно думал о переезде в Харьков. Он приезжал туда дважды...

А. Ф. Иоффе был назначен председателем Ученого совета УФТИ. Хотя роль его была и не велика, но значение огромно. Дело в том, что об общих принципах нам договариваться было нечего. Они были едины. Но в моменты затруднений Абрам Федорович со свойственным ему тактом всемерно поддерживал нас в правительственных органах Украины или в академических кругах.

Некоторые товарищи в правительстве УССР – да и в Москве – подозревали, не избавляется ли А. Ф. Иоффе путем создания новых институтов от нежелательных ему людей или не «бегут» ли на Украину те, кто недоволен Абрамом Федоровичем. Приезды А. Ф. Иоффе в Харьков, его дружеские письма и бескорыстная поддержка во всех вопросах, которые я поднимал, рассеивали всякие подозрения.

После 1933 г., когда я был назначен председателем Ученого совета УФТИ, Абрам Федорович приезжал иногда на несколько дней к нам в гости. Ему, по-видимому, нравилась научная жизнь института, были приятны встречи с друзьями. Докладов он не делал, но подолгу беседовал с разными людьми.

Не могу не отметить и прекрасное отношение к нашему институту как со стороны правительственных органов Украины, лично В. Я. Чубаря и председателя ВСНХ УССР Б. К. Сухомлина, так и со стороны харьковской интеллигенции – ученых всех факультетов университета, Электромеханического института, Математического института во главе с С. Н. Бернштейном и Н. И. Ахиезером, а также руководящих работников заводов (ХЭМЗ, ХПЗ), которые очень помогали УФТИ, охотно принимали на работу наших студентов, защитивших диплом, а также некоторых сотрудников УФТИ. Инженеры ХЭМЗ и Турбинного завода принимали участие в научных собраниях УФТИ и выступали у нас с докладами».

Безусловно, в Харькове во всю мощь проявился как административный, так и организаторский таланты Ивана Васильевича Обреимова. И именно он – первый директор УФТИ – сумел заложить стратегические направления института, которые и позволили первенцу физической науки Украины за невероятно короткий срок выйти на передовые научные позиции.

Стремительнейший старт УФТИ во многом был определен именно тем, что первый директор не побоялся сделать главную ставку на фундаментальную науку и талантливую молодежь. Много лет спустя академик И. В. Обреимов с особой гордостью подчеркнет в своих мемуарах: *«Если у меня есть серьезная заслуга перед*



*страной – то это одна заслуга: это то, что я культивировал теоретическую физику в Харькове и тем самым в СССР...*

*Своих теоретиков у нас не было...*

*Было сделано так, что в Харькове у нас всё время гостили приезжие учёные, так что получался центр теоретической физики...*

*Важно было, что теоретики приезжали не как гости, а длительно работали.*

*Этого нигде в СССР не было».*

Этот феномен УФТИ даже более полувека спустя будет специально отмечен на академических страницах «Вестника Российской академии наук»: «Факт приглашения ведущих иностранных ученых в Харьков можно оценить, только если учесть, что из-за ограниченных, как всегда, валютных возможностей это приглашение конкурировало с альтернативой купить новый спектрограф или какой-нибудь другой прибор. По существу, же приезд западных ученых оказал влияние на всю российскую науку того времени, поскольку в летний период в Харькове собирались и исследователи из других городов Советского Союза. Физики несомненно отметят, что Иван Васильевич приглашал наиболее активно и плодотворно работавших специалистов того времени, иными словами, приглашал “кого надо”».

Будучи дальновидным ученым, первый директор УФТИ исключительно большое значение придавал налаживанию широкого международного научного сотрудничества.

На сегодняшний день имеется возможность объективно восстановить картину тогдашних уникальных международных контактов УФТИ по мемуарным заметкам И. В. Обреимова: «Было сделано так, что в Харькове у нас всё время гостили приезжие учёные, так что получался центр теоретической физики.

*В 1929 г. приезжали П. Иордан (Гамбург), Ф. Гейтлер (Гёттинген). Ежегодно на два месяца приезжал из Ленинграда В. А. Фок...*

*С весны 1930, когда мы уже въехали в своё здание, к нам приезжали: 3 раза (3 года) П. Дирак из Кембриджа, год работал Подольский из Принстона (США). Дважды приезжал П. С. Эренфест из Лейдена... Дважды приезжал Плачек и сделал с Ландау работу о строении линии рэлеевского и рамановского рассеяния. Дважды приезжал Вайскопф. Один раз приезжал Пайерлс...*

*Важно было, что теоретики приезжали не как гости, а длительно работали.*

*В 1933 г. переехал окончательно Л. Д. Ландау (до сих пор он часто приезжал в качестве гостя и по хорошему свойству своего характера вмешивался во все дела УФТИ). Образовалась группа его учеников: А. И. Ахиезер, Е. М. Лифшиц, И. Я. Померанчук.*

*В 1934 г. на три недели приезжал Нильс Бор и каждый день до обеда работал с теоретиками.*

*Этого нигде в СССР не было».*

Сотрудничество с иностранными учеными (как с носителями передового научного знания) в значительной степени способствовало приобщению уфтинцев к новейшим успехам западноевропейской науки, так как последние новости физической науки они получали, что называется, из первых уст.

Кроме того, уже на этапе становления УФТИ многим видным зарубежным ученым были посланы приглашения занять вакантные должности руководителей научных отделов. В качестве показательного примера процитируем официальное приглашение, адресованное голландскому физику-теоретику П. С. Эренфесту.

Март 1929 г.

Глубокоуважаемый и дорогой Павел Сигизмундович!

Большой Физико-технический институт в Харькове, о котором нам пришлось несколько раз с Вами говорить, по-видимому, близок к осуществлению. Нам поручено его организовать. Одна из первых наших мыслей была привлечь Вас к организации этого института. Всем известна та роль, которую Вы уже сыграли для развития физики в России, Ваш неизменный благожелательный интерес к ней и та постоянная помощь, которую Вы оказываете. Поэтому мы просим Вас принять место консультанта Украинского физико-технического института. Мы очень просим Вас сюда приехать в этом году месяца на два. Для возмещения Ваших расходов по поездке мы приготовили 2000 рублей. Одновременно с этим мы посылаем Вам некоторые материалы по организации института.

Одна из самых важных вещей в организации физики – это организация теоретической физики, и вместе с тем это для нас одна из самых трудных задач, потому что теоретиков у нас мало и теоретическая молодежь боится покидать Ленинград и Москву, чтобы не потерять руководства. Нам кажется, что если бы Вы согласились стать во главе теоретической физики Харькова, перенести туда Вашу школу, то это было бы одной из важнейших вещей не только для развития физики в нашем Союзе, но и для мировой физики. Здесь дело не только в том, что наш Союз приобрел бы в Вашем лице физика, стоящего в первом ряду физиков, но и в Вашем исключительном умении группировать вокруг себя и теоретиков и экспериментаторов, давать помощь и совет в вопросах научной организации. Нам кажется, что в смысле научной работы, быта, климата Вы могли бы иметь условия не хуже тех, которые имеете сейчас; в смысле же пользы для физики — принесли бы здесь неизмеримо больше.

Мы надеемся, что во время Вашего приезда Вы разрешите поднять и подробно обсудить с Вами вопрос о полном переходе Вашем в Харьков, приезд же Ваш даст Вам возможность лично увидеть условия научной работы и обстановку.

Ваши: А. Иоффе, И. Обреимов.

Весьма показателен и следующий факт: *«молодой физик-теоретик из Венгрии Л. Тисса, которому так понравилась обстановка в УФТИ, что он решил остаться в Харькове...»*

*Кстати, о его человеческих качествах говорит такой факт: ему как иностранному специалисту была назначена более высокая зарплата, чем нам. Но Тисса посчитал это несправедливым и попросил установить ему такую же зарплату, как и у других теоретиков».*

А вот как описывает причины Виктор Фредерик Вайскопф (кстати, в 1961-1965 гг. – генеральный директор ЦЕРНа), побудившие его приехать в Харьков: *«Я не мог получить работы ни в Англии, ни во Франции .... Я почти на год уехал в Россию, в Харьков, где можно было получить работу, обеспечивающую средства к существованию».*

Стоит процитировать по этому поводу и небезынтересное харьковское письмо П. Эренфеста:

*«Я пробыл в России с 14 декабря по 14 января все время в Харькове, среди моих друзей в Украинском Физико-техническом институте. Жизнь там сейчас полна трудностей. Они, может быть, не так сильно ощущаются иностранными специалистами – в смысле возможностей приобретения продуктов и других предметов. Несмотря на эти трудности, все мои друзья чувствуют себя положительно счастливыми и работают с замечательным энтузиазмом. Они очень, очень устают, в частности потому, что все здесь страшно быстро разрастается, а с этим связано много беспорядка, чертовски непроизводительно отнимающего до 80% энергии (население Харькова за несколько лет выросло с 200 тысяч человек до миллиона и продолжает увеличиваться). Но вот удивительная вещь: каждый мужчина, каждая женщина, которые учатся, чувствуют себя совершенно необходимыми обществу, и Вы представляете, что это чувство означает! Сам я точно так же немедленно почувствовал себя молодым и полным инициативы...»*

*Все мои друзья настаивают на том, что я должен навсегда переехать в Россию и помочь им. Я начал сейчас обсуждать с моими датскими и русскими друзьями возможность некоего комбинированного плана, который позволил бы мне проводить 4 месяца в Голландии, 6 – в России, а два - странствуя между моими немецкими и скандинавскими коллегами, знакомясь с новыми работами, выполняемыми в Берлине, Лейпциге, Геттингене и Копенгагене».*

Научный престиж УФТИ поднимал и тот уникальный факт, что лауреат Нобелевской премии П. Дирак был избран почетным членом Ученого совета. А научными консультантами института согласились стать такие легенды физической науки тех лет, как П. Эренфест, П. Капица, Г. Гамов. К тому же на базе УФТИ с 1932 года начал издаваться первый советский физический журнал *«Physikalische Zeitschrift der Sowjet Union»* на иностранных языках.

Поэтому неудивительно, что уже первые научные успехи уфтинцев были на уровне лучших работ того времени и стали достоянием широкой гласности на 17 съезде ВКП(б):

*«Исследовательская работа по физике в сколько-нибудь широком масштабе велась в СССР до последнего времени только в Ленинграде и Москве. Рост промышленности Союза поставил задачу создания крупных научных учреждений, работающих в области физики, и в других важнейших промышленных центрах.»*

*По инициативе Украинского правительства в план первой пятилетки ВСНХ СССР была внесена организация научно-исследовательского физико-технического института в Харькове (УФТИ). Организация нового института была поручена Ленинградскому физико-техническому институту, который выделил для него большую группу (около 20 чел.) научных работников. Эта группа вместе с частью харьковских физиков и составила основное ядро института ...»*

*Развитию работ по теоретической физике институт все время уделяет особое внимание, так как эти работы, кроме их непосредственного значения, в сильной степени способствуют общему высокому уровню работ института. Тесное взаимодействие теоретических и экспериментальных работ составляет одну из самых существенных черт научного лица института ...»*

*Большой успех работы теоретиков вызвал приток ученых из других институтов Союза и из-за границы для временной работы в институте...»*

*За истекшие три года своей работы Украинский физико-технический институт стал одним из крупнейших научных центров Союза в области физики и пользуется большим авторитетом за границей».*

И надо отдать должное первому директору УФТИ. Именно Иван Васильевич Обреимов не побоялся собрать в стенах вновь созданного института целую плеяду молодых и талантливых ученых, которые и вывели институт на передовые научные позиции. Причем многие прошли стажировку в крупнейших научных центрах мира.

Особо судьбоносным для УФТИ стало приглашение в 1932 году Льва Давидовича Ландау на должность руководителя отдела теоретической физики. Вот как этот факт был прокомментирован более полувека спустя на страницах «Вестника Российской академии наук»: *«Его отношения с Иоффе обострились настолько, что Лев Давидович вынужден был уйти из института. Поскольку характеристики его оказались резко негативными, то к моменту, когда Обреимов пригласил Ландау в Харьков, он уже около года мыкался в Ленинграде без работы».*

На момент переезда в Харьков Ландау исполнилось всего лишь 24 года. В этой связи стоит процитировать отзыв о научных трудах Л. Д. Ландау тех лет, за авторитетной подписью физика-теоретика В. Фока: *«Работы Л. Д. Ландау пользуются большой известностью как у нас в Союзе, так и за границей. Так, в посвященном квантовой механике XXIV томе (часть 1) известной германской энциклопедии физики «Handbuch der Physik»*

имя Ландау цитируется 11 раз. Нужно заметить, что этот том издан в 1933г., а большинство работ Ландау относится к периоду после 1933 г.».

Кроме того, Л. Д. Ландау имел личные научные контакты с ведущими физиками-теоретиками мира, так как ранее совершил европейское турне по научным центрам мира. По этому поводу приведем выдержку из его ленинградского «Отчета о научной заграничной командировке в Данию, Швейцарию и Германию в 1929-1931гг.»: «С октября 1929 г. до апреля 1930 г. я находился в заграничной командировке за счет НКП, а затем до марта 1931 г. по рокфеллеровской стипендии. За это время я имел возможность работать в контакте с наиболее выдающимися современными теоретиками, из которых наибольшее влияние на мою работу оказали N. Bohr (Копенгаген), W. Pauli (Цюрих) и W. Heisenberg (Лейпциг)».

Кстати, Нильс Бор впоследствии приезжал к Ландау в Харьков. Это была дань уважения и его любимому ученику, и Украинскому физико-техническому институту. До наших дней сохранился отзыв Нильса Бора о тогдашнем посещении УФТИ:

*«Я рад возможности выразить свои чувства высокого восхищения и удовлетворения, с которыми я увидел прекрасный новый Физико-технический институт в Харькове, где отличные условия для экспериментальной работы во всех областях современной физики сочетаются с величайшим энтузиазмом и успехами под замечательным руководством и тесным сотрудничеством с блестящим физиком-теоретиком»*

22.5.1934

Нильс Бор».

Харьковский период жизни Л. Д. Ландау продолжался всего лишь пять лет – с 1932-го по 1937 год. Но именно он заложил краеугольный камень в основание харьковской школы теоретической физики, ставшей впоследствии одной из самых известных украинских теоретических школ в мире.

Много лет спустя патриарх теоретической физики Украины академик Александр Ильич Ахиезер – харьковский ученик и преемник Ландау на посту руководителя теоретического отдела УФТИ – имел веские основания, чтобы объективно подытожить: «Если бы меня попросили назвать всего двух физиков, в максимальной мере прославивших украинскую науку, то я бы назвал теоретика Л. Д. Ландау и экспериментатора Л. В. Шубникова».

Следует пояснить приведенную выше цитату. Дело в том, что именно Лев Васильевич Шубников возглавил в УФТИ первую(!) в СССР криогенную лабораторию.

По воспоминаниям его жены Ольги Трапезниковой, «еще в нашу бытность в Лейдене И. В. Обреимов предложил Льву Васильевичу переехать в Харьков, во вновь созданный УФТИ, директором которого он стал».

Лев Васильевич Шубников, будучи сотрудником ЛФТИ, обучался методике проведения эксперимента при низких температурах в прославленной Лейденской лаборатории. И выбор для научной стажировки именно Лейденского университета (1575 г. – дата основания) был тогда не случайным, так как еще в 1894 году при этом университете была организована первая в мире криогенная лаборатория, которая впоследствии стала одним из самых авторитетных мировых центров физики низких температур.

Следует особо подчеркнуть: Лейденская лаборатория существенно помогла УФТИ в оснащении первой в СССР (и четвертой в мире) криогенной лаборатории, руководителем которой в период становления (1931–1937 гг.) был Л. В. Шубников. В частности, «очень большую помощь лаборатории оказывал Э. Вирсма [куратор Лейденской лаборатории. – Прим. А. Т.]. Он каждый год, вплоть до 1935 года, приезжал в Харьков и привозил массу всяких вещей, без которых мы не могли работать... Он привозил все, что мы в Союзе не могли достать... Разумеется, все это Э. Вирсма делал с одобрения В. де Хааса [директора Лейденской лаборатории. – Прим. А. Т.] – мы получали обещанную ранее в Лейдене помощь».

Стоит напомнить и тот факт, что именно Иван Васильевич Обреимов стоял у истоков уфтинской криогенной лаборатории. Прочитаем по этому поводу его письмо к Петру Леонидовичу Капице, который в то время работал в Кавендишской лаборатории.

И. В. Обреимов – П. Л. Капице

12 июня 1928 г.

<...>. То, о чем с Вами говорили насчет провинции, осуществляется, и даже, м. б., более бурно и стремительно, чем нужно.

В наш ГФТИ поступило разом два предложения организовать 2 физических института, один в Томске, другой у Харкові.

С Томском дело сделано... С Харьковом дело не только не кончено, но даже и не начато. В жертву Харькову обречен Ваш покорный слуга. В Харькове предполагается дело очень интересное – большая криогенная лаборатория с водородом и гелием. Отчасти по моей инициативе...

Должен Вам сказать, что к институтам сверхредноутам у меня влечения нет, т. ч. я мыслю себе – это очень скромный институт. Но вот когда я думаю о Вас, то мне кажется, что если бы вы там были, то это был бы допинг для нашей физики, и для физики вообще.

Вы подумайте, что можно сделать в таком институте. А для отечества – это ведь тоже будет институт, который будет конкурировать по своему значению с Питером и будет Питер подтягивать...

В этой связи нельзя не вспомнить и о последующей уфтинской борьбе за Петра Леонидовича Капицу, который с 1921 года находился в многолетней научной командировке в Англии.

Л. В. Каменев – П. Л. Капице

Москва, 23 января 1929 г.

Уважаемый Петр Леонидович. Сейчас мы организуем в Харькове Физико-технический институт по типу Ленинградской [физико-технической] лаборатории академика А. Ф. Иоффе. Придавая этому делу исключительное значение, я решил просить Вас принять участие в организации этого института в качестве консультанта. Если Вы соглашаетесь на мое предложение, то на Вашей обязанности будет лежать ежегодный проезд в СССР на 2-3 месяца. Вопрос о визах (въездных и проездных) для Вас и Вашей семьи не будет связан для Вас ни с какими затруднениями и может быть при Вашем первом приезде сюда урегулирован так, как это Вам будет удобно. За Вашу работу здесь Вы будете получать ежегодно 2 000 рублей, причем в эту же сумму будут входить и Ваши расходы по поездкам сюда.

Зная о ваших научных успехах, я полагаю, что Ваши приезды сюда окажут вообще существенное значение не только для Харьковского института, но и вообще для дела научно-технического развития СССР. Ознакомившись с Вашим вопросом, я вообще был удивлен, что до сего времени не велось официальных переговоров с Вами о перенесении Ваших работ, как советского ученого, в СССР. Те средства, которыми располагает НТУ, вполне позволяют создать для Вас в СССР – Ленинграде, Москве или Харькове – те условия, которые необходимы для успешного развития Вашей работы. Я полагаю, что при приезде сюда мы побеседуем с Вами об этих возможностях. Я вполне гарантирую вам, однако, что никакие давления в смысле немедленного переезда сюда на Вас не будут оказаны и весь вопрос будет решен в смысле наиболее успешного и бесперебойного хода Вашей работы.

Уважающий Вас,  
Л. Каменев.

И. В. Обреимов – П. Л. Капице

Кембридж, 17 ноября 1929 г.

Дорогой Петр Леонидович. Нас всех крайне порадовало твое согласие быть консультантом у нас в Институте, и я надеюсь, что это лишь первый шаг к твоему постоянному переезду в СССР для постоянной научной работы. Ты прекрасно знаешь, как быстро научная работа развивается у нас в стране и какое громадное значение придается ей у нас.

Я тебя могу уверить, что все необходимое, чтобы облегчить твой переезд будет предпринято и частично уже предпринято с нашей стороны.

1. Принимая во внимание твои моральные обязательства по отношению [к] Кавендишской лаборатории, мы включили в пятилетний план УФТИ на 1929/30 г. сумму в 250 тысяч рублей валютой на выкуп твоей лаборатории. Этот 5-летний план утвержден Президиумом ВСНХ УССР...

3. В пятилетний план на 1929/30 год включена сумма в 300 тысяч рублей на постройку твоей Магнитной Лаборатории на участке нашего института.

4. Что касается твоего положения, то оно будет таким, каким ты пожелаешь, т.е. либо директором УФТИ, либо независимым Старшим Физиком, либо можешь иметь совершенно независимую лабораторию...

И. Обреимов

П. Л. Капица – А. А. Капице

Москва, 15 апреля 1935 г.

<...>. Настроение убийственное. Представь, уже почти 8 месяцев я сижу и ничего не делаю, и это не потому, что не желаю, а, конечно, потому, что я не могу...

Замечания: «Почему вы не поедете в Хар[ьков], работать там», так же наивны, как предложить шоферу сесть на козлы извозчика. То, что автомобиль и телега служат для езды, не значит еще, что один и тот же человек может на них ездить. Так и ученого нельзя пересаживать из одной лаборатории в другую.

Первый директор УФТИ также, невзирая на авторитеты, твердо отстаивал свою точку зрения на стратегические пути развития института: *«После моего окончательного переезда в Харьков, 2 апреля 1930 г., мои контакты с А. Ф. Иоффе значительно сократились. Сократились они частично и из-за того, что Абрам Федорович не во всем одобрял направление работ Харьковского института. С одной стороны, в Харькове имела место «гипертрофия теоретической физики»... С другой стороны, в Харькове успешно проводились работы по физике атомного ядра».*

Судьбоносен и следующий факт: именно уфтинцы впервые в СССР (и вторые в мире!) расщепили атомное ядро. Временная разница в воспроизведении знаменитого кембриджского эксперимента (апрель 1932 года) в УФТИ (октябрь 1932 года) – всего лишь полгода.

На скромной экспериментальной базе института был воспроизведен фундаментальный эксперимент одной из старейших физических лабораторий мира – Кавендишской лаборатории, основанной в 1874 году при старейшем университете Европы – Кембриджском университете, который в свою очередь ведет летоисчисление с 1209 года.

УФТИ тотчас же рапортовал тогдашнему советскому правительству о проведенном фундаментальном эксперименте. Ниже дословно приводится текст этой исторической телеграммы, которая была напечатана на первой полосе газеты *«Правда»* от 22 октября 1932 года.

#### Разрушено ядро атома лития

Крупнейшее достижение советских ученых

МОСКВА, тт. СТАЛИНУ, МОЛОТОВУ, ОРДЖОНИКИДЗЕ, «ПРАВДЕ».

Украинский физико-технический институт в Харькове в результате ударной работы к XV годовщине Октября добился первых успехов в разрушении ядра атома.

10 октября высоковольтная бригада разрушила ядро лития; работы продолжаются.

Директор УФТИ *Обреимов*. Секретарь парткома *Шепелев*.  
Местком – *Федоритенко*.

Уфтинская телеграмма – беспрецедентное за всю историю СССР событие. УФТИ вскоре были выделены значительные средства для сооружения еще более мощных ядерно-физических установок. С того времени ядерная физика и техника – одно из ведущих направлений института.

К концу 30-х годов прошлого столетия УФТИ стал одним из наиболее авторитетных институтов СССР. И первая выездная сессия физической группы АН СССР была проведена именно в Харькове, на базе УФТИ (23-24 января 1937 года). Заслуживает внимания следующая выдержка из резолюции данной сессии: *«УФТИ за шесть лет своего существования превратился в один из ведущих физических институтов Советского Союза. Сессия отметила огромное научное и техническое значение создания в УФТИ криогенной лаборатории, стоящей на уровне лучших мировых лабораторий низких температур»*.

Этот стремительный взлет УФТИ можно по праву назвать научным феноменом. Со слов директора-организатора УФТИ Ивана Васильевича Обреимова, «мы в УФТИ правильно оценили тенденцию развития науки, что дальнейшее развитие науки пойдет по двум направлениям: физика конденсированной фазы (которую называют сейчас физикой твердого тела, или физикой кристаллов, причем оба названия меня несколько коробят) и физика атомного ядра.

УФТИ был инициатором в СССР направления «атомного ядра». В других центрах этим вопросом не занимались и не предполагали заниматься, отчасти считая, что для народного хозяйства эта проблема лежит в далеком поле. Физика твердого тела. Надо помнить, что до появления Петра Капицы мы были первой и единственной лабораторией в СССР и четвертой в мире, где был жидкий водород, а с 1933 г. и жидкий гелий. Мне вспоминается встреча с О. Мейсснером в Берлинском Рейхсанштальте (аналогичен нашему Институту метрологии) в 1928 г. Он мне сказал: «Вы желаете иметь машину жидкого водорода? Вопрос в том, будете ли Вы иметь достаточно культурного механика, чтобы её обслужить. Я такого механика добыть себе не могу и сам обслуживаю эту установку. Другие на ней работают, а я обслуживаю. Немецкие механики, конечно, культурнее русских механиков. Ваша судьба такая: Вы будете механиком при машине, а другие будут с жидким водородом работать. Впрочем, я буду Вам охотно помогать».

И он, действительно, очень помогал, не с водородом, где помощь оказывал Лейден, персонально профессор Кроммелин и главный механик Флим, а с гелием. Но пророчество Мейсснера не оправдалось. В руках механика Ивана Петровича Королева, а затем Владимира Ивановича Богатова и их воспитанников работали и две установки жидкого водорода, а впоследствии и установка жидкого гелия, полученная с помощью того же Мейсснера, работают и поныне.

Мы также правильно оценили масштаб и широкий стиль работ, стиль хороших измерений.

Мы не задавались целью «догнать и перегнать», а просто делали как можно лучше, как можно тщательнее те исследования, которые, мы считали, стоят в повестке дня физики. С этой стороны я должен вспомнить Льва Васильевича Шубникова, который создал в УФТИ стиль критической, тщательной, точной работы. Надо вспомнить также Вадима Сергеевича Горского. Открытие им упорядоченных и частично упорядоченных твердых растворов является гордостью УФТИ.

Мы переезжали в Харьков – город, уже обладающий высокой культурой в области физики. Я имею школу Дмитрия Аполлинарьевича Рожанского, продолжателем дела которого был Александр Абрамович Слуцкий. Напомню, что до 1941 г. мировой рекорд по 30-мм-ым магнетронным колебаниям принадлежал УФТИ».

Показательна также и следующая подробность: во времена директорства И. В. Обреимова широкий демократизм определял истинное лицо УФТИ. Так, в частности, «каждую неделю в УФТИ происходило заседание совета и проводился реферативный семинар... На заседаниях совета докладывались все работы, выполнявшиеся в лабораториях УФТИ, а на реферативном собрании – новые журнальные статьи по различным разделам физики. Прекрасный овальный стол, за которым сидели участники заседаний, создавал неповторимую обстановку легкости и даже интимности, чему содействовал еще подаваемый чай с пирожными.

Такая обстановка не препятствовала, а, пожалуй, даже способствовала накалу дискуссий и бескомпромиссности критики».

Первый директор УФТИ, как отмечают его современники, имел привычку задавать докладчикам вопросы, которые, на первый взгляд, были довольно-таки просты. Но впоследствии оказывалось, что именно они вскрывают суть данной темы. *«Кто не спрашивает, тот никогда не поумнеет»* – любимый афоризм Ивана Васильевича Обреимова. Кстати, свой «простой» вопрос он предварял, как правило, такими словами: *«Простите мне мою невежественность»*.

К тому же Иван Васильевич всегда просил называть фамилии тех ученых, на результаты которых делается ссылка, *«чтобы было ясно, из какой лаборатории вышла работа – можно ей доверять или нет»*. А при анализе научных результатов замечал: *«Есть три вида лжи: ложь, наглая ложь и статистика, как говорил Бисмарк»*.

Иван Васильевич Обреимов, будучи не тщеславным и не честолюбивым, ввел в институте весьма доверительный стиль руководства. Рассказывают, что на двери его служебного кабинета висела дощечка, где

были прибиты в ряд гвоздики, внизу которых были подписи: «Я – у Тоси», «Я – у Гарбера», «Не входить», «Я – у себя». Указателем служил металлический жетон, который вешался на соответственный гвоздик.

Первый директор УФТИ, несмотря на трудности беспокойного организационного периода, не забросил и свои личные научные изыскания. По воспоминаниям Ольги Трапезниковой, у директора УФТИ «был свой отдел, куда входили В. С. Горский, Н. А. Бриллиантов, А. Ф. Прихотько и др... Я помню, как И. В. Обреимов ходил по институту с двумя ведрами на коромысле, наполненными жидким воздухом».

Особой гордостью директора-организатора УФТИ была институтская библиотека, которая именно благодаря его хлопотам и была собрана. Примечательно и то, что он доверял ключи и предоставлял возможность сотрудникам УФТИ работать в любое время суток.

Кроме того, по воспоминаниям академика Бориса Георгиевича Лазарева, «в институте все были увлечены спортом – альпинизмом, туризмом, теннисом, лыжами, наконец, многие занимались в школе верховой езды. Из всех этих увлечений Иван Васильевич не устоял перед последним (думаю, по примеру его ученицы Антонины Федоровны Прихотько – пятигорской казачки). Мы (Лейпунские, Хоткевич, Лазаревы) занимались в одной группе с Иваном Васильевичем...

Иван Васильевич, объясняя свои физические особенности, говорил мне, что в детстве он много занимался игрой на рояле, «все время, пока другие бегали, играли, я занимался упражнениями на рояле». И надо сказать, что играл он превосходно, исполняя самые сложные произведения Бетховена, Баха».

В 1933 году Иван Васильевич Обреимов неожиданно для всех принимает решение: уйти с директорского поста. Официальная версия в его автобиографии изложена так: «По окончании организационного периода в 1933 г. перешел в том же институте на должность председателя НТС и заведующего лабораторией физики кристаллов».

До сегодняшнего дня неизвестно, почему потребовалось отойти от дел руководства институтом именно в период стремительного взлета УФТИ.

**Mykola Fedorovych Shul'ga** (70th anniversary of birth)**Микола Федорович Шульга** (до 70-річчя від дня народження)

15 вересня 2017 року виповнилося 70 років провідному українському вченому в галузі квантової електродинаміки та фізики взаємодії частинок великої енергії з речовиною, лауреату Державної премії України в галузі науки і техніки, генеральному директору Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут», академіку-секретарю Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України, академіку НАН України Миколі Федоровичу Шульзі.

М.Ф. Шульга народився 1947 року в Харкові. Вибір життєвого шляху він зробив ще в старших класах середньої школи, вирішивши, що піде навчатися до фізико-технічного факультету Харківського державного університету (ХДУ). Закінчивши 1965 року середню школу зі срібною медаллю, він того самого року здійснив свою мрію, вступивши до фізико-технічного факультету ХДУ, який закінчив 1971 року з відзнакою. Перші кроки в науці М.Ф. Шульга зробив ще в студентські роки. На здібного і цілеспрямованого студента з університетської кафедри теоретичної ядерної фізики Миколу Шульгу звернули увагу академік О.І. Ахієзер і професор П.І. Фомін. Саме вони навчили талановитого студента професійним навичкам наукової роботи. І вже 1971 року в співавторстві з ними було виконано його перше серйозне наукове дослідження з теорії процесу когерентного випромінювання релятивістських електронів у кристалі, результати якого були надруковані в престижному науковому журналі «Письма в ЖЭТФ». Згодом О.І. Ахієзер став для нього не тільки вчителем і визнаним науковим авторитетом, а й старшим товаришем. Наукова співпраця з цим видатним фізиком-теоретиком тривала понад чверть століття. Після закінчення ХДУ 1971 року М.Ф. Шульгу було призвано до лав Збройних сил СРСР, і він прослужив офіцером два роки в м. Волгоград. З 1973 року і до теперішнього часу його життєвий і науковий шлях пов'язаний з Харківським фізико-технічним інститутом (нині – ННЦ ХФТІ). В його стінах під керівництвом академіка О.І. Ахієзера він захистив кандидатську дисертацію (1977 р.) і став одним з наймолодших докторів фізико-математичних наук (1985 р.). 1981 р. його було обрано на посаду старшого наукового співробітника, 1986 р. він став провідним науковим співробітником. Упродовж 1986-1997 рр. очолював цільовий теоретико-експериментальний відділ у Відділенні ядерної фізики ХФТІ. У 1996-1997 рр. М.Ф. Шульга брав активну участь в організації та становленні Інституту теоретичної фізики у складі ННЦ ХФТІ і став його першим директором. Протягом 2004–2015 рр. Микола Федорович обіймав посаду заступника генерального директора з наукової роботи. 2016 р. його обрали генеральним директором Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України.

М.Ф. Шульга є автором і співавтором близько 300 наукових праць, зокрема, 12 монографій та монографічних оглядів, опублікованих у провідних вітчизняних і закордонних виданнях. Тематика наукових інтересів Миколи Федоровича вражає своєю широтою. Напрями його наукових досліджень пов'язані з

теоретичною фізикою, фізикою високих енергій, ядерною фізикою, фізикою взаємодії швидких заряджених частинок з речовиною, фізикою атомних реакторів. Про вагомість наукових досягнень та результатів, отриманих М.Ф. Шульгою як особисто, так і у співавторстві зі своїми вчителями, колегами та учнями, переконливо свідчить навіть короткий і неповний їх перелік. Зокрема, він разом зі своїм науковим керівником академіком НАН України О.І. Ахієзером розвинув квазікласичну теорію когерентного випромінювання ультрарелятивістських електронів у орієнтованих кристалах і теорію електромагнітних злив у кристалах при високих енергіях. Передбачив явище динамічного хаосу при русі швидких заряджених частинок у кристалах, а також спільно зі своїм учнем С.П. Фомінін – ефект пригнічення випромінювання електронів великої енергії в тонких шарах речовини (цей ефект у світовій літературі дістав назву ефект Терновського–Шульги–Фоміна, TSF-effect). Разом із іншим своїм учнем А.А. Гриненком запропонував стохастичний механізм відхилення пучків заряджених частинок великої енергії зігнутих кристалом (умови реалізації цього механізму у світовій літературі так і називають – «умови Гриненка–Шульги»). Існування обох цих ефектів було підтверджено у спеціальних експериментах на прискорювачах ЦЕРН у 2005– 010 рр. у рамках міжнародних колаборацій NA63 та UA9. Разом зі своїм учнем С.В. Трофименком розвинув теорію низки квантово-електродинамічних процесів при високих енергіях у речовині з «напівголими» електронами. Крім того, разом із С.П. Фомінін, В.В. Пилипенком та Ю.П. Мельником М.Ф. Шульга розвинув теорію хвилі ядерного горіння в безпечному ядерному реакторі четвертого покоління Феоктистова – Теллера.

Наукові досягнення Миколи Федоровича були високо оцінені як науковою спільнотою, так і суспільством. М.Ф. Шульга – лауреат Державної премії України у галузі науки і техніки (2002 р.) і премії НАН України імені О.С. Давидова (2000 р.). Його нагороджено Почесною грамотою Міністерства освіти і науки України (2003 р.), Почесною грамотою Кабінету Міністрів України (2008 р.), відзнакою НАН України «За наукові досягнення» (2007 р.). У 2003 р. його було обрано членом-кореспондентом Національної академії наук України за спеціальністю «обчислювальна фізика», а 2009 р. – академіком Національної академії наук України за спеціальністю «ядерна фізика». У травні 2015 р. він стає академіком-секретарем Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України. Цю посаду він обіймає й дотепер.

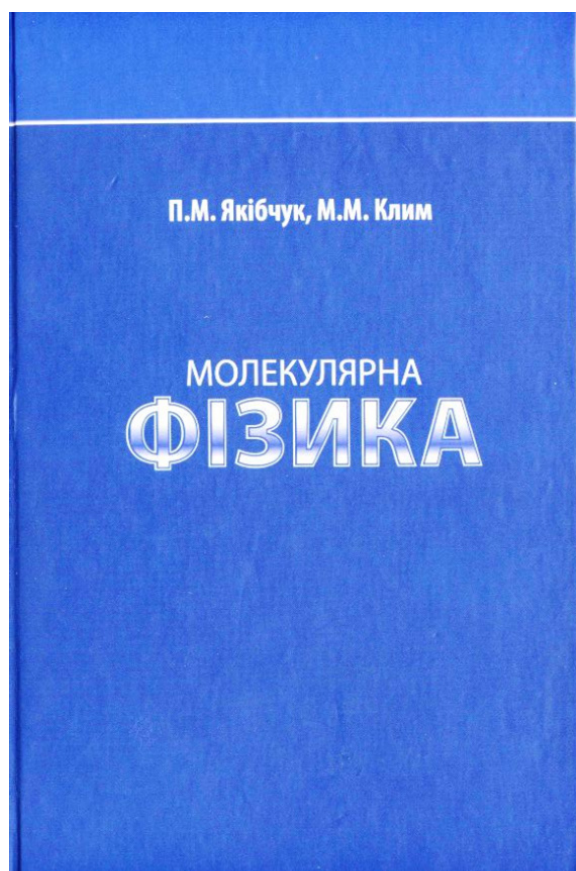
М.Ф. Шульга проводить активну науково-організаційну роботу як член програмних комітетів низки міжнародних наукових конференцій (ICAS, RREPS, Channeling). Він був також одним із організаторів Міжнародної конференції з суперсиметрії та квантової теорії поля (Харків, 2000 р.), головою оргкомітету міжнародних конференцій з квантової електродинаміки та статистичної фізики (Харків, 2001, 2006, 2011 рр.). 2015 р. Микола Федорович став одним із засновників Міжнародної асоційованої лабораторії (Франція–Україна) під назвою «Розроблення детекторних систем для експериментів на прискорювачах і технологій для фізики прискорювачів» (LIA IDEATE) та членом її керівного комітету. У період з 2004 по 2013 р. М.Ф. Шульга був віце-президентом Українського фізичного товариства, членом Координаційної ради якого є й дотепер. М.Ф. Шульга входить до складу Наукової ради НАН України з проблем ядерної фізики та атомної енергетики і Наукової ради країн СНД з проблем застосування методів ядерної фізики у суміжних галузях, а також до складу низки наукових рад ННЦ ХФТІ та Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Він є членом редколегій «Українського фізичного журналу», журналу «Питання атомної науки та техніки», «Східно–європейського фізичного журналу».

Велику увагу Микола Федорович приділяє роботі з молодими фізиками. З його ініціативи та за безпосередньої участі в Харкові з 2004 року в навчальному корпусі фізико–технічного факультету Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна почав роботу загальноміський фізичний семінар «Проблеми сучасної фізики». Тепер всі бажаючі, незалежно від віку та професійної підготовки, мають можливість послухати публічні лекції відомих вчених про сучасні дослідження високої науки, як безпосередньо, так і переглянути їх у запису в Інтернеті. Він підготував багатьох науковців вищої кваліфікації, серед яких 11 кандидатів і 5 докторів наук. Серед його учнів 8 лауреатів Державної премії України в галузі науки і техніки. Упродовж багатьох років М.Ф. Шульга читає в Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна курс лекцій з квантової електродинаміки при високих енергіях у речовині (для теоретиків та експериментаторів). З 2014 р. він завідує кафедрою ядерної та медичної фізики цього університету. У тому самому 2014 р. йому присвоєно звання почесного доктора Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, а в 2015 р. – почесного доктора Інституту теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України.

Наукова громадськість, друзі, колеги та учні Миколи Федоровича щиро вітають ювіляра з 70–річчям і бажають йому невичерпних життєвих сил та плідного довголіття на науковій та просвітницькій нивах України.

*М.О. Азаренков, О.С. Бакай, В.С. Бакіров, Ю.А. Бережної, Ю.Л. Болотін, В.М. Восводін, І.С. Гаркуша, І.О. Гірка, Л.М. Давидов, А.М. Довбня, І.М. Карнаухов, В.О. Катрич, А.І. Кирдін, В.Ф. Клепиков, О.Ю. Корчин, С.В. Литовченко, С.В. Пететмінський, Ю.В. Слюсаренко, С.П. Фомін, В.Д. Ходусов, О.П. Щусь*





Молекулярна фізика : підручник / П.М. Якібчук, М.М. Клим. – Вид. 2-ге, допов. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 20154. – 584 с.

ISBN 978-966-613-975-0.

У підручнику викладено основи кінетичної теорії, термодинаміки, розкрито взаємозв'язок між макроскопічними властивостями і внутрішньою будовою речовини. Висвітлені питання пов'язані з внутрішньою будовою і фізичними властивостями газів, рідин і твердих тіл, явищами, які протікають у газах при малих тисках. Багато уваги приділено молекулярно-кінетичній теорії газів, кінематичним характеристикам молекулярного руху, реальним газам, фізиці рідин основам термодинаміки. Детально виведено основні співвідношення і наведено приклади, що їх підтверджують. Значну увагу приділено розкриттю фізичного змісту законів молекулярної фізики.

**УДК 539.1/2(075.8)**  
**ББК В36я 73-1**

© П.М. Якібчук, М.М. Клим., 2003

© П.М. Якібчук, М.М. Клим., 2015

© Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015

\*\*\*\*\*

blank line)

(blank line)

**PACS:** Here you must specify PACS codes

(blank line)

## INSTRUCTIONS FOR PREPARING MANUSCRIPT (TITLE)

(blank line)

**N.N. Author<sup>1</sup>, N.N. Co-author(s)<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Affiliation*

<sup>2</sup>*Affiliation (if different from Authors affiliation)*

*e-mail: [corresponding\\_authors@mail.com](mailto:corresponding_authors@mail.com)*

Received January 14, 2018

(blank line)

Each paper must begin with an abstract. The abstract should be typed in the same manner as the body text (see below). Please note that these Instructions are typed just like the manuscripts should be. The abstract must have at least 1000 phonetic symbols, supplying general information about the achievements, and objectives of the paper, experimental technique, methods applied, significant results and conclusions. Page layout: the text should be printed on the paper A4 format, at least 3 pages, with margins of: Top - 3, Bottom, Left and Right - 2 cm. The abstract should be presented in English (only for foreign authors), Ukraine and Russian.

**KEYWORDS:** there, must, be, at least, 5 keywords

(blank line)

This is introduction section. This paper contains instructions for preparing the manuscripts. The text should be prepared in .doc format (using MS Word).

(blank line)

### INSTRUCTIONS

The text should be typed as follows:

- title: Times New Roman, 12 pt, ALL CAPS, bold, 1 spacing, centered;
- authors: name, initials and family names; Times New Roman, 12 pt, bold, 1 spacing, centered;
- affiliation(s): Times New Roman, 9 pt, italic, 1 spacing, centered;
- abstract: Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, justified;
- body text: Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, justified; paragraphs in sections should be indented right (tabulated) for 0.75 cm;
- section titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering, one line should be left, blank above section title;
- subsection titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering in accordance to the section (see below), one line should be left blank above subsection title;
- figure captions: width of the figure should be 85 or 170 mm, figures should be numbered (Fig. 1) and titled below figures using sentence format, Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line); one line should be left blank below figure captions;
- table captions: width of the table should be 85 or 170 mm, tables should be numbered (Table 1.) and titled above tables using sentence format, Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line), tables should be formatted with a single-line box around the outside border and single ruling lines between rows and columns; one line should be left blank below tables;
- equations: place equations centered, numbered in Arabic (1), flush right, equations should be specially prepared in MathType; one line should be left blank below and above equation.

(blank line)

### Additional instructions

Numerated figures and tables should be embedded in your text and placed after they are cited. Only black and white drawings and sharp photographs are acceptable. Letters in the figures should be 3 mm high. The figures should be presented in one of the following graphic formats: jpg, gif, pcx, bmp, tif.

(blank line)

### REFERENCES

Titles of journals, articles and author names in references should be given in Roman script. References should be numbered in the order of referring in the text, e.g. [1], [2-5], etc. Do not superscript your reference numbers. Cite references as in journal format. The full references should be listed in numerical order of citation in the text at the end of the paper (justified), Times New Roman, 9 pt, 1 spacing. References should be given in the following form:

#### *Journals*

1. Holzwarth G., Eckart G. Fluid-dynamical approximation for finite Fermi systems // Nucl. Phys. - 1979. - Vol. A325. - P.1-30.

#### *Books*

2. Bertsch G.F., Broglia R.A. Oscillations in finite quantum systems. Ch. 6. - Cambridge: Cambridge University, 1994. - 150 p.

#### *Chapters*

3. Van der Woude A. The electric giant resonances // Electric and magnetic giant resonances in nuclei / Ed. by J. Speth. - Singapore: World Scientific P.C., 1991. - P. 99-232.

#### *Conference or symposium proceedings*

4. Smolanzuk R., Skalski J., Sobiczewski A. Masses and half-life of superheavy elements // Proc. of the International Workshop 24 on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations / Ed. by H. Feldmeier et al. - GSI, Darmstadt, 1996. - P.35-42.

### Special Notes

1. Use International System of Units (SI system).
2. It is undesirable to use acronyms in the titles. Please define the acronym on its first use in the paper.
3. Refer to isotopes as <sup>14</sup>C, <sup>3</sup>H, <sup>60</sup>Co, etc.

Наукове видання

**СХІДНО-ЄВРОПЕЙСЬКИЙ ФІЗИЧНИЙ ЖУРНАЛ**

**Том 5 Номер 1**

**EAST EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS**

**Volume 5 Number 1**

Збірник наукових праць  
англійською, українською, російською мовами

Коректор – Коваленко Т.О.  
Технічний редактор – Гірник С.А.  
Комп'ютерне верстання – Гірник С.А.

Підписано до друку 20.03.2018. Формат 60×84 /8. Папір офсетний.

Друк ризографічний.

Ум. друк. арк. 12,6. Обл.-вид. арк. 10

Тираж 300 пр. Зам. № Ціна договірна

61022, Харків, майдан Свободи, 4  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Видавництво

Надруковано Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
61022, Харків, майдан Свободи, 4, тел. +380-057-705-24-32  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09